**Universidade de São Paulo
Instituto de Física**

Teoria das Matrizes Aleatórias e o Formalismo da Entropia Generalizada

Alberto Carlos Bertuola

Orientador: Prof. Dr. Mauricio Porto Pato

Tese de doutorado apresentada ao Instituto de
Física para a obtenção do título de Doutor em
Ciências

Banca examinadora:

**Prof. Dr. Mauricio Porto Pato (IFUSP)
Prof. Dr. Mario Jose de Oliveira (IFUSP)
Prof. Dr. Paulo Teotonio Sobrinho (IFUSP)
Prof. Dr. Valdeci Marvulle (UNIFEI)
Prof. Dr. Alfredo Ozorio de Almeida (CBPF)**

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 4181

SBI-IFUSP

305M810T4181

São Paulo
2004

Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

dl. 16/12/04

530.255352

B552+

D

Ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Bertuola, Alberto Carlos

Teoria das Matrizes Aleatórias e o Formalismo da
Entropia Generalizada.

São Paulo - 2004

Tese (Doutoramento) – Universidade de São Paulo
Instituto de Física - Depto. de Física Matemática

Orientador: Prof. Dr. Mauricio Porto Pato
Área de Concentração: Física

Unitermos

1. Densidade de níveis;
2. Entropia generalizada;
3. Caos quântico ensemble;
4. Entropia (Termodinâmica);
5. Matrizes (álgebra);
6. Caos (Sistemas dinâmicos).

USP/IF/SBI-001/2005

Resumo

A introdução de uma nova expressão matemática para a entropia, permite construir novos *ensembles* na Teoria das Matrizes Aleatórias. Neste trabalho, apresenta-se uma estrutura geral para construção de todos os possíveis *ensemble*. Portanto, os elementos das matrizes podem ser números reais, complexos ou mesmo *quaternions*. O princípio da entropia (não-extensiva) máxima e o Cálculo Variacional são usados para realizar essa façanha. Esta tese está comprometida com a construção do *Ensemble* Ortogonal Generalizado, cujas matrizes aleatórias são simétricas e seus elementos são os números reais, especificamente. As distribuições das matrizes, as distribuições de um elemento da matriz e as estatísticas espectrais são obtidas, estudadas e os resultados apresentados.

Abstract

The introduction of a new mathematical expression for the entropy allows the construction of new ensembles in Random Matrices Theory. A general structure is presented to the construction of all possible ensembles. Therefore the matrix's elements can be real numbers, complex numbers or even quaternions. The generalized of the maximum entropy (nonextensive) principle and the variational calculus are to used to realize this achievement. This thesis concerned with the construction of the Generalized Orthogonal Ensemble, whose random matrices are symetric and its elements are real numbers. The matrix distribution, the distribution of a element of the matrix and the spectrum statistical were to obtained, studied and the results presented.

Dedico esta tese para

todos os meus filhos.

AGRADECIMENTOS

Aproveito a oportunidade para agradecer as seguintes pessoas:

_ Meu orientador, por me conduzir com muita segurança no caminho da pesquisa científica.

_ Prof. Dr. Oriol Bohigas, pela leitura antecipada deste trabalho e por suas sugestões valiosas.

_ Prof. Dr Mahir S. Hussein, por sua proveitosa presença no dia a dia de trabalho no Instituto de Física da USP.

_ Prof. Dr Josué X. Carvalho e Prof. Dr. Luiz C. Albuquerque, pelas suas amizades sinceras.

Ao CNPq, pelo financiamento e pelo respeito que sempre me reservou.

A Deus; só nele reside a perfeição.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	<i>Ensembles</i> Gaussianos	4
2.1	Conceitos Fundamentais na Teoria dos Espectros	4
2.2	<i>Ensemble</i> Ortogonal Gaussiano	12
2.2.1	Distribuição das matrizes	13
2.2.2	Distribuição de um elemento da matriz H	15
2.2.3	Distribuição dos espaçamentos entre níveis vizinhos	16
2.2.4	Distribuição dos autovalores das matrizes	17
2.2.5	Distribuição de probabilidade das componentes de um autovetor	19
3	<i>Ensembles</i> Generalizados de Matrizes Aleatórias	22
3.1	Procedimento Geral	22
3.2	<i>Ensemble</i> Ortogonal Generalizado para $H_{2 \times 2}$	24
3.2.1	Distribuição das matrizes aleatórias $H_{2 \times 2}$	25
3.2.2	Distribuição de espaçamentos nos domínios de q	30
3.2.3	Distribuição dos elementos da matriz $H_{2 \times 2}$	42
3.2.4	Simulações computacionais	49
4	<i>Ensemble</i> Ortogonal Generalizado de Matrizes $N \times N$	52
4.1	Distribuição das Matrizes Aleatórias $H_{N \times N}$	52
4.2	Distribuição de um Elemento da Matriz $H_{N \times N}$	54
4.2.1	Primeiro domínio: $1 < q < q_{\text{máx}}$	54
4.2.2	Segundo domínio: $q < 1$	61
4.3	Distribuição dos Autovalores da Matriz $H_{N \times N}$	64
4.3.1	Primeiro domínio: $1 < q < 1 + \frac{4}{N(N+1)}$	64
4.3.2	Segundo domínio: $q < 1$	69
4.4	Simulações Numéricas	70
4.5	Desdobramento do Espectro	72
4.6	Distribuição dos espaçamentos	73
4.7	Distribuição da componente do autovetor	75

5	Correlações	76
5.1	Correlações entre dois elementos da matriz	76
5.1.1	Primeiro domínio: $1 < q < q_{máx}$	77
5.1.2	Segundo domínio: $q < 1$	79
5.2	Correlações entre dois autovalores da matriz	81
6	Aplicações	82
6.1	Sistemas Eletrônicos Desordenados	82
6.2	Outras possíveis aplicações	84
7	CONCLUSÃO	86
8	APÊNDICE	88
8.1	Formulário	88
8.1.1	Função Beta	88
8.1.2	Função Gama	88
8.1.3	Relação entre as funções Beta e Gama	89
8.1.4	Transformada de Fourier	89
8.1.5	Funções de Bessel modificadas	89
8.1.6	Relação entre as funções de Bessel modificadas	89
8.1.7	Distribuição de Lévy ([21])	89
8.1.8	Função Hipergeométrica confluyente	89
8.1.9	Stirling	90
8.1.10	Elemento de volume de uma hiperesfera	90
8.2	Algoritmo Metropolis	90
8.3	Algoritmo ACB MPP	91

Capítulo 1

Introdução

O presente trabalho apresenta um método para construir novos *ensembles* na Teoria das Matrizes Aleatórias (TMA), na qual o princípio da máxima entropia é usado. A técnica do cálculo variacional é usada na Mecânica Estatística (ME) e também na construção dos *Ensembles* Gaussianos na TMA. No *Ensemble* Canônico (ME), usa-se esse princípio para se obter a função densidade de probabilidade, sendo a energia total de um sistema, a variável aleatória que flutua em torno de um valor médio. Os vínculos usados são a normalização dessa distribuição e a existência do valor médio da energia. A função variacional é a entropia que possui um valor máximo e cuja expressão analítica é dada pela equação

$$\frac{S}{k_b} = - \sum_{i=1}^w p_i \ln p_i \quad . \quad (1.1)$$

Essa definição (1.1) é conhecida como entropia de Boltzmann-Gibbs [1]. A constante k_b é a constante de Boltzmann; w é o número de configurações que o sistema tem possibilidade de assumir.

Recentemente foi proposta uma nova expressão analítica para a entropia [3], na tentativa de descrever estatisticamente, muitos fenômenos que apresentavam desvios quando descritos pela entropia tradicional (1.1). Essa nova entropia tem a seguinte representação matemática

$$\frac{S_q}{k_b} = \frac{1}{q-1} \left(1 - \sum_{i=1}^w P_i^q \right) \quad . \quad (1.2)$$

A variável q é um número real conhecido como parâmetro entrópico. Verifica-se que a definição de Boltzmann-Gibbs (1.1) é obtida como um caso limite da entropia não-extensiva (1.2), tomando-se o limite

$$\lim_{q \rightarrow 1} \frac{S_q}{k_b} = \frac{S}{k_b} \quad . \quad (1.3)$$

Na Teoria das Matrizes Aleatórias, a entropia (1.2) é definida com devidas adaptações envolvendo o conceito de matriz, cujos elementos são variáveis aleatórias que seguem uma distribuição. De maneira análoga àquela que é utilizada para a construção do *Ensemble* Canônico (ME), usa-se o cálculo variacional para gerar os *ensembles* que constituem a Teoria das Matrizes Aleatórias, seja qual for a expressão analítica da entropia. Nessas construções, quase todo trabalho envolve o uso dessa técnica matemática. Os *ensembles*, construídos usando a entropia de Boltzmann-Gibbs, foram estudados profundamente e testados em várias áreas da Física, por exemplos: na Física Nuclear, na Física do Estado Sólido(cristais), Cromodinâmica Quântica (QCD), Gravitação Quântica, entre outras. O sucesso dessa teoria foi tanto, justamente por se colocar em pleno e impressionante acordo com os dados experimentais. Atualmente as aplicações se estendem para outros campos do conhecimento, por exemplos: à Teoria dos Números (Matemática), Biologia, Meteorologia e também, recentemente, à Econofísica [4, 5, 6].

Esta tese está organizada em sete capítulos e um apêndice final. O capítulo I contém esta pequena introdução, porque julgou-se importante destacar as principais idéias utilizadas, em relação ao conceito de entropia. Por outro lado, esta introdução tem a responsabilidade de esclarecer a organização desta tese, mostrando antecipadamente, um pouco do que vem pela frente. No capítulo II, são descritas as idéias fundamentais do caos quântico, especificando as variáveis aleatórias usadas e as expressões analíticas das densidades de probabilidade envolvidas. Apresentam-se a classificação dos sistemas físicos, quanto a simetria apresentada, dentro de um quadro geral. Nesse capítulo, o *Ensemble* Ortogonal Gaussiano (GOE) é apresentado de forma sucinta, desde a sua construção até os resultados das estatísticas mais importantes. O capítulo III contém uma maneira geral usada para construção de qualquer ensemble generalizado. Aplica-se então na construção do *Ensemble* Ortogonal Generalizado (GOE-q) de matrizes reais de ordem dois. Apresenta-se nesse capítulo, as expressões analíticas das distribuições das matrizes aleatórias, das distribuições de um elemento da matriz, das distribuições dos espaçamentos entre dois níveis vizinhos e de uma componente de um autovetor. Inicialmente estuda-se o *Ensemble* Ortogonal das matrizes quadradas de ordem dois, para obter uma maior clareza das idéias fundamentais, aliada a uma simplicidade desejada nos cálculos. Além disso, existe a possibilidade de comparar os resultados analíticos obtidos, com aqueles que já estão inseridos em varios livros, listados nas referências. No capítulo IV, as distribuições de probabilidades das matrizes $N \times N$, as densidades de níveis e também as distribuições de um elemento da matriz são apresentadas e discutidas nos seus aspectos mais relevantes para este trabalho. O capítulo V está reservado para o estudo detalhado das correlações entre dois elementos da matriz e algumas idéias centrais das possíveis correlações entre dois níveis quantizados. No capítulo VI são exibidas alguns exemplos de aplicações dos resultados dessa tese. O último capítulo contém as principais conclusões do que foi adquirido no decorrer

das pesquisas. O apêndice final contém um formulário e algumas explicações a respeito dos algoritmos usados nas simulações.

~ o ~ • ~ o ~

Francisco M. Magalhães

Capítulo 2

Ensembles Gaussianos

Com a possibilidade da proposta de uma nova expressão analítica para a entropia, novos *ensembles* podem ser introduzidos na Teoria das Matrizes Aleatórias. Mas antes de se discutir as generalizações dos *Ensembles* Gaussianos, estabelecidas a partir da entropia de Boltzmann-Gibbs, apresentam-se nesse capítulo as idéias principais utilizadas para as construções dos *ensembles* que são capazes de caracterizar o caos nos sistemas quânticos. Serão apresentadas as variáveis aleatórias usadas, cujas respectivas distribuições de probabilidades descrevem as suas propriedades estatísticas. No final desse capítulo, comentam-se os aspectos importantes do *Ensemble* Ortogonal Gaussiano (GOE), tanto para matriz de ordem mínima quanto para aquelas de ordem genérica.

2.1 Conceitos Fundamentais na Teoria dos Espectros

No estudo da manifestação do caos em Mecânica Quântica, o conceito de universalidade configurou-se como algo fundamental. Contudo, os objetos de estudo existentes nos *ensembles*, também têm que ser cuidadosamente apresentados, de maneira que se destaque a diferença entre as distribuições estatísticas que apresentam o caráter universal, daquelas que refletem apenas as propriedades específicas. Por exemplo, a distribuição de níveis de um espectro pertencente a sistema quântico é uma característica peculiar desse espectro, enquanto que a distribuição das distâncias entre níveis vizinhos, convenientemente reescalados, torna-se uma propriedade comum de uma classe de sistemas. Esse caráter de universalidade, permite a classificação dos sistemas físicos em famílias, que correspondem a classes universais de *ensembles* de matrizes aleatórias.

Um exemplo bem sucedido na Física que serve para ilustrar o uso do conceito de universalidade é a teoria de Landau do magnetismo [1], que descreve um comportamento universal na magnetização de um material. Essa universalidade se manifesta quando uma relação, entre a magnetização (M) e o campo externo

(H) aplicado a uma amostra, é apresentada da seguinte maneira:

$$\frac{M}{t^\beta} = Y \left(\frac{H}{t^\Delta} \right), \quad (2.1)$$

em que β e Δ são os expoentes críticos e t uma temperatura próxima da temperatura crítica T_c , definida nessa teoria por: $t = \left| \frac{T-T_c}{T_c} \right|$. A função Y e os expoentes críticos são universais quando a temperatura está na vizinhança da temperatura crítica. O carácter universal da função Y é percebido visualmente no gráfico a seguir, por meio da existência de duas formas possíveis, separadas por uma temperatura crítica bem determinada.

Figura 1: Campo magnético externo em função da magnetização.

Na figura 1, o eixo das abscissas se relaciona com a magnetização do material, pela divisão $\frac{M}{t^\beta}$. O eixo das ordenadas se refere ao campo magnético externo, aplicado ao material, na relação $\frac{H}{t^{\gamma+\beta}}$. A substância usada na experiência que resultou nos dados da figura 1 é o brometo de cromo, sal metálico identificado na Química Inorgânica pela fórmula iônica: $CrBr_3$.

Essa técnica de investigação científica, na qual se procura algum tipo de universalidade, é utilizada nas teorias estatísticas dos espectros de níveis; sejam eles níveis de energia dos núcleos atômicos, dos próprios átomos ou mesmo das moléculas. Também podem ser incluídos outros espectros diversos, tais como as frequências de vibrações elásticas nos sólidos ou as raízes da função Zeta de Riemann. Chama-se a atenção para o fato da teoria dos espectros ter aplicações nas mais variadas áreas do conhecimento científico [13]. Os níveis quantizados de qualquer natureza são transformados por meio de um processo conhecido: o “desdobramento” do espectro, em um novo espectro de variáveis cujo espaçamento médio entre elas seja unitário. É no espaço dessas novas variáveis que os espectros

podem ser comparados entre si e conseqüentemente classificados em dois tipos de sistemas, quanto às distribuições das distâncias entre variáveis vizinhas. A figura seguinte exemplifica o que foi dito, apresentando alguns espectros de níveis de alguns sistemas [10].

Figura 2: Alguns exemplos de espectros quantizados.

Os espaçamentos, entre níveis vizinhos dos espectros nas colunas (a) e (b) da figura 2, seguem a distribuição de Poisson, que é uma distribuição exponencial

$$P(s) = e^{-s}, \quad (2.2)$$

em que s é a diferença entre os níveis vizinhos. As distribuições dos espaçamentos, entre os níveis nas colunas (c), (d) e (e), pode-se dizer que seguem a conhecida distribuição de Wigner. Esta distribuição é o produto de uma função polinomial, por uma exponencial gaussiana

$$P(s) = cs^\beta e^{-\alpha s^2}, \quad (2.3)$$

em que β^1 representa a intensidade da repulsão entre os níveis, assumindo o valor $\beta = 1$ para os espectros nas colunas (c) e (d) e $\beta = 2$ na coluna (e). Essa distribuição é também a distribuição de espaçamentos entre os autovalores das matrizes, na TMA, sendo o parâmetro β , a medida da intensidade da repulsão entre os níveis vizinhos, distinguindo os ensembles: ortogonal ($\beta = 1$), unitário ($\beta = 2$) e simplético ($\beta = 4$). Os espectros da figura 2 estão dispostos de maneira que os dois primeiros, à esquerda, não se repelem: $P(0) = 1$. As colunas restantes

¹O parâmetro β , apesar de aparecer em dois momentos (2.1) e (2.3), possuem interpretações distintas por pertencerem a diferentes áreas da Física.

apresentam uma repulsão crescente até o espectro “cerca”. Esse é o espectro do oscilador harmônico, possuidor da repulsão máxima entre os níveis vizinhos.

Sabe-se hoje que existe uma relação entre as simetrias de um sistema físico e os ensembles da TMA, que melhor descrevem as propriedades estatísticas das flutuações dos espectros. A tabela² a seguir estabelece as classificações dos sistemas físicos .

S	IT	L	IR	H	GC	β	f	$P(s)$
R	sim	-	sim	-	-	-	n	e^{-s}
c a ó t i c o	sim	inteiro $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$	- sim	real simé- trica	orto- gonal (GOE)	1	$\frac{n(n+1)}{2}$	$se^{-\frac{\alpha s^2}{2}}$
		$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$	não	quater- nion real	simplé- tico (GSE)	4	$n(2n+1)$	$s^4 e^{-\frac{\alpha s^2}{2}}$
	não	-	-	hermi- teana com- plexa	uni- tário (GUE)	2	n^2	$s^2 e^{-\frac{\alpha s^2}{2}}$

Tabela 1: Classificação geral dos sistemas físicos quanto à simetria.

Muitos fenômenos físicos foram estudados experimentalmente, confirmando essa classificação. Um exemplo na área da Física Nuclear é a distribuição dos espaçamentos entre os primeiros vizinhos, dos níveis do núcleo do Érbio [10]. O melhor ajuste é a distribuição de Wigner do GOE ($\beta = 1$).

² S -sistema, R -regular, IT -invariância temporal, L -momento angular, IR -invariância rotacional, H -matriz hamiltoniana, GC -grupo canônico, f -números de elementos independentes, $P(s)$ -distribuição de espaçamentos.

Figura 3: Distribuição dos espaçamentos entre os níveis do núcleo do Érbio.

A figura 3 mostra o histograma dos espaçamentos entre os níveis de energia vizinhos do núcleo pesado do átomo de Érbio e a respectiva curva de ajuste, que é identificada justamente pela distribuições dos espaçamentos de Wigner, prevista teóricamente no GOE. A repulsão linear ($\beta = 1$) próxima a origem é observada nesta figura. A baixa estatística apresentada pelo histograma, se deve as dificuldades experimentais para obtenção dos níveis quantizados. A distribuição de Poisson para os espaçamentos também é apresentada nesta figura, podendo ser usada para comparar a forma do seu decaimento assintótico, em relação ao decaimento da distribuição de Wigner.

No campo da Análise Matemática (na Teoria dos Números), existem dois exemplos clássicos contidos em alguns livros textos, que exemplificam o caráter universal das distribuições de Poisson e da distribuição de Wigner. Um deles é a distribuição das diferenças entre números primos vizinhos, que obedece a distribuição de Poisson (2.2). O outro exemplo é a distribuição das diferenças entre as raízes vizinhas da função Zeta de Riemann. Observa-se que neste caso, o melhor ajuste da distribuição dos espaçamentos é dado pela distribuição de Wigner (2.3), ou seja, seu espectro é classificado no *Ensemble* Unitário Gaussiano ($\beta = 2$) de acordo com a distribuição dos espaçamentos de Wigner .

Figura 4: Distribuição dos espaçamentos entre as raízes da função Zeta de Riemann: $10^{12} < n < 10^{12} + 10^{15}$; n é a quantidade de raízes.

A figura 4 mostra o comportamento semelhante à função de segundo grau próximo da origem. A repulsão quadrática entre os níveis vizinhos, nesse caso, é mais intensa que aquela repulsão apresentada pela distribuição de Wigner no GOE, cuja intensidade é do tipo linear ($\beta = 1$). As matrizes aleatórias, nesse *ensemble* (GUE) são hermiteanas e seus elementos independentes são números complexos.

O estudo dos bilhares quânticos tem uma grande importância para a Física Experimental do caos quântico. Porém, sua importância vai além disso. Por exemplo, a compreensão do que é o comportamento regular ou o comportamento caótico em sistemas quânticos, pode ser adquirida com maior clareza e simplicidade valendo-se dos estudos dos bilhares quânticos. Para isso usa-se um exemplo simples, conhecido como bilhar quântico circular. Sua versão clássica se resume em estudar as trajetórias de uma partícula livre, contendo apenas energia do tipo cinética, confinada em uma região circular limitadora do seu movimento. Algumas trajetórias da uma partícula em um círculo podem ser visualizadas na figura seguinte, que mostra a condição de reflexão no contorno circular .

Figura 5: Trajetórias de uma partícula confinada no círculo.

Nota-se na figura 5 as regiões classicamente proibidas e a periodicidade da trajetória. Estas são as características de um sistema clássico regular, ou seja, o sistema é integrável.

A quantização do movimento para uma partícula confinada em um círculo é idealizada na forma de uma superfície plana (ou membrana) que vibra num contorno circular. As energias quantizadas associadas aos modos das vibrações da membrana, calculadas por meio da equação de onda e suas respectivas condições de contornos, permitem confeccionar um histograma dos espaçamentos entre os níveis vizinhos e o ajuste mais adequado é realizado pela distribuição dos espaçamentos de Poisson (2.2). A figura³ a seguir mostra o excelente ajuste obtido.

³Trabalho de iniciação científica realizado por G. Ajeje sob orientação do Prof. Dr. M. P. Pato.

Figura 6: Espaamentos entre os nveis no bilhar quntico circular.

A figura 6 mostra o histograma dos espaamentos entre os nveis do bilhar quntico circular, com ajuste da distribuio de Poisson dos espaamentos.

Observa-se que a regio central no crculo (Figura 5)  inacessvel ao movimento da partcula. Porm, inserindo um retngulo convenientemente entre dois semicrculo, surgem as trajetrias errticas. No existe nenhuma regio proibida ao movimento desta partcula. Esse bilhar conhecido como *stadium*  um exemplo de um sistema classicamente catico.

Figura 7: Bilhar stadium.

As energias quantizadas da membrana *stadium* permitem obter um histograma dos espaamentos entre os nveis vizinhos, que  ajustada com a distribuio de

Wigner (2.3) do *Ensemble* Ortogonal Gaussiano (GOE). O ajuste pode ser observado na figura [8] abaixo.

Figura 8: Distribuição dos espaçamentos no stadium.

A figura 8 mostra o histograma dos espaçamentos entre os níveis vizinhos, obtidos com a quantização do bilhar *stadium*. Essa figura mostra também o ajuste teórico realizado pela distribuição de Wigner no histograma. Em contraste, observa-se a distribuição de Poisson na mesma figura.

Tendo em vista os exemplos citados anteriormente e aqueles contidos nas literaturas publicadas, a distribuição de espaçamentos entre níveis de energia foi considerado a função que contém a universalidade.

A conjectura de Bohigas-Giannoni-Schmit estabelece a classificação dos sistemas, mediante a duas distribuições dos espaçamentos: a distribuição de Poisson que descreve os sistemas regulares; e a distribuição de Wigner, os sistemas caóticos.

O *Ensemble* Ortogonal Gaussiano é muito requerido nas aplicações, portanto os detalhes de sua construção, usando a técnica do cálculo das variações, serão apresentados em seguida.

2.2 *Ensemble* Ortogonal Gaussiano

Algumas estatísticas importantes como as distribuições dos níveis de energia, as distribuições dos espaçamentos entre níveis vizinhos de energia, as distribuições das componentes dos autovetores, entre outras; podem ser obtidas a partir das distribuições das matrizes aleatórias, simétricas e com elementos reais (GOE). Esse *ensemble* é bem conhecido, tanto no tratamento dado particularmente para

matriz 2×2 , como no caso mais geral das matrizes $N \times N$. Existe uma vantagem em se trabalhar inicialmente com as matrizes 2×2 , que é a possibilidade de se obter analiticamente a expressão para distribuição dos espaçamentos entre níveis vizinhos, cujo interesse é prioritário por conter um caráter universal. Mas as aproximações feitas no caso geral (matriz $N \times N$) devem ser também, mencionadas para os usos posteriores nesta tese.

2.2.1 Distribuição das matrizes

A matriz hamiltoniana no GOE é do tipo simétrica e seus elementos são reais e aleatórios, obedecendo a uma distribuição estatística. Usando inicialmente, como exemplo, uma matriz hamiltoniana 2×2 , com a representação

$$H = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{12} & h_{22} \end{bmatrix} . \quad (2.4)$$

Define-se o parâmetro f , sendo o número de elementos independentes de uma matriz que nesse caso (2.4) assume o valor: $f = 3$.

Nota-se que a diagonal principal da matriz de H^2 contém todos elementos independentes da matriz H :

$$H^2 = \begin{bmatrix} h_{11}^2 + h_{12}^2 & h_{12}(h_{11} + h_{22}) \\ h_{12}(h_{11} + h_{22}) & h_{22}^2 + h_{12}^2 \end{bmatrix} . \quad (2.5)$$

O traço de H^2 também contém os elementos independentes da matriz H , relacionados pela adição dos elementos da diagonal principal H^2

$$\text{tr} H^2 = h_{11}^2 + h_{22}^2 + 2h_{12}^2 . \quad (2.6)$$

Usando o mesmo raciocínio, é possível generalizar a expressão do traço (2.6) para matriz de qualquer ordem.

A densidade de probabilidade de uma matriz H é uma função de todos elementos independentes dessa matriz. A distribuição de uma matriz $H_{2 \times 2}$ é uma função de três variáveis independentes

$$P(H) = P(h_{11}, h_{22}, h_{12}) . \quad (2.7)$$

A entropia da informação de Boltzmann-Gibbs-Shannon (1.1) é adaptada convenientemente para incluir a matriz H

$$S = - \int dH P(H) \ln P(H) , \quad (2.8)$$

em que dH é o produto das diferenciais de todos elementos independentes da matriz H , que no caso 2×2 é dado explicitamente por

$$dH = dh_{11} dh_{22} dh_{12} . \quad (2.9)$$

O primeiro vínculo que $P(H)$ está sujeito é a normalização no espaço dos elementos independentes da matriz H

$$\int dH P(H) = 1 \quad . \quad (2.10)$$

O segundo vínculo é a existência do valor médio do traço da matriz H^2 , que matematicamente é dado por

$$\int dH P(H) \text{tr} H^2 = \mu \quad . \quad (2.11)$$

A técnica do cálculo variacional requer a definição de uma função auxiliar, representada pela letra F , que leva em consideração a expressão analítica da entropia da informação (2.8) e os vínculos (2.10) e (2.11)

$$F = - \int dH P(H) \ln P(H) + \lambda_1 \left[1 - \int dH P(H) \right] + \lambda_2 \left[\mu - \int dH \text{tr} H^2 P(H) \right] , \quad (2.12)$$

em que os parâmetros λ_1 e λ_2 são os conhecidos multiplicadores de Lagrange. Usando o princípio da maximização da entropia da informação, $\delta F = 0$, obtém-se a expressão analítica de $P(H)$ que é dependente dos multiplicadores de Lagrange. Essas constantes podem ser fixadas substituindo a expressão analítica de $P(H)$ nos próprios vínculos (2.10) e (2.11), chegando ao seguinte resultado⁴ para matriz 2x2

$$P(H) = \sqrt{2} \left(\frac{\gamma}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \exp(-\gamma \text{tr} H^2) \quad . \quad (2.13)$$

O parâmetro γ pode ser fixado adotando-se o valor unitário para o espaçamento médio. Observa-se o fato de $P(H)$ ser uma distribuição exponencial gaussiana (2.13), garantindo sempre a existência dos vínculos (2.10) e (2.11).

A expressão analítica da distribuição de uma matriz $H_{N \times N}$ é obtida de maneira análoga, aquela usada para as matrizes de ordem mínima, que nesse caso se escreve

$$P(H) = \left(\sqrt{2} \right)^{\frac{N(N-1)}{2}} \left(\frac{\gamma}{\pi} \right)^{\frac{N(N+1)}{4}} \exp(-\gamma \text{tr} H^2) \quad . \quad (2.14)$$

A igualdade (2.14) é a distribuição das matrizes aleatórias do GOE. Tal distribuição depende de todos os elementos independentes de cada matriz. Esses elementos estão todos contidos no traço do quadrado da matriz.

⁴Trabalho de iniciação científica do autor sob orientação do Prof. Dr. M. P. Pato.

2.2.2 Distribuição de um elemento da matriz H

A distribuição de um elemento da matriz $H_{2 \times 2}$ pode ser obtida de maneira geral, por meio do cálculo da integral

$$P(h_{11}) = \int dh_{22} dh_{12} P(h_{11}, h_{22}, h_{12}) . \quad (2.15)$$

Observa-se que a integração é efetuada no espaço dos elementos independentes, subtraindo convenientemente um deles. O resultado, nesse caso, é dado por

$$P(h_{11}) = \sqrt{\frac{\gamma}{\pi}} e^{-\gamma h_{11}^2} . \quad (2.16)$$

Esse mesmo resultado poderia ser obtido imediatamente da distribuição das matrizes em (2.13), aproveitando a independência das distribuições dos elementos

$$P(H) = \left[\sqrt{\frac{\gamma}{\pi}} e^{-\gamma h_{11}^2} \right] \left[\sqrt{\frac{\gamma}{\pi}} e^{-\gamma h_{22}^2} \right] \left[\sqrt{\frac{2\gamma}{\pi}} e^{-2\gamma h_{12}^2} \right] . \quad (2.17)$$

A distribuição de qualquer elemento da matriz $H_{2 \times 2}$ é uma das gaussianas dadas em (2.17). A distribuição de um elemento da diagonal principal coincide com (2.16). A distribuição de um elemento fora da diagonal principal é identificada por

$$P(h_{12}) = \sqrt{\frac{2\gamma}{\pi}} e^{-2\gamma h_{12}^2} . \quad (2.18)$$

No caso geral, a distribuição de um elemento qualquer da matriz pode ser obtido diretamente da distribuição das matrizes estabelecida em (2.14). A forma fatorada da distribuição das matrizes é dada por

$$P(H) = \left[\prod_{i=1}^N \left(\frac{\gamma}{\pi} \right)^{\frac{N}{2}} \exp(-\gamma h_{ii}^2) \right] \left[\prod_{1 \leq j < i < N} \left(\frac{2\gamma}{\pi} \right)^{\frac{N(N-1)}{4}} \exp(-2\gamma h_{ij}^2) \right] . \quad (2.19)$$

A distribuição de um elemento da diagonal matriz é identificada diretamente em (2.19) por

$$P(h_{ii}) = \sqrt{\frac{\gamma}{\pi}} \exp(-\gamma h_{ii}^2) . \quad (2.20)$$

A distribuição de um elemento fora da diagonal da matriz é o segundo fator, no produto (2.19), dada por

$$P(h_{ij}) = \left(\sqrt{\frac{2\gamma}{\pi}} \right) \exp(-2\gamma h_{ij}^2) . \quad (2.21)$$

2.2.3 Distribuição dos espaçamentos entre níveis vizinhos

A diagonalização de uma matriz é geralmente realizada por meio de métodos matemáticos numéricos. Para matriz de ordem mínima, obtêm-se os autovalores de forma analítica. Os autovalores da matriz $H_{2 \times 2}$ (2.4) são

$$E_{\pm} = \frac{h_{11} + h_{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{h_{22} - h_{11}}{2}\right)^2 + h_{12}^2} . \quad (2.22)$$

Usando os dois autovalores encontrados e uma certa quantidade de álgebra, relacionam-se todos autovalores com todos elementos independentes da matriz $H_{2 \times 2}$, na seguinte igualdade

$$E_+^2 + E_-^2 = h_{11}^2 + h_{22}^2 + 2h_{12}^2 , \quad (2.23)$$

comumente interpretada como sendo a invariância do traço da matriz H^2 .

O único espaçamento existente entre os dois níveis de energia é calculado da forma indicada pelas igualdades:

$$s = |E_+ - E_-| = \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2} . \quad (2.24)$$

A distribuição dos espaçamentos entre níveis vizinhos é obtida calculando a integral

$$P(s) = \int dH P(H) \delta(s - \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2}) . \quad (2.25)$$

Substitui-se a expressão analítica de $P(H)$ (2.13), na igualdade anterior (2.25). Efetuando-se todas as integrações, no espaço de todos os elementos independentes da matriz aleatória $H_{2 \times 2}$, obtém-se a distribuição dos espaçamentos dada por

$$P(s) = \gamma s \exp\left(-\frac{\gamma s^2}{2}\right) . \quad (2.26)$$

Observa-se em (2.26) que o termo linear representa a repulsão entre os níveis quantizados. Isso pode ser visto matematicamente na igualdade: $P(0) = 0$. Nesse caso não existe possibilidade dos espaçamentos assumirem valores iguais. Não é permitido a degenerescência dos níveis no espectro que apresenta caos quântico.

Considerando ainda a matriz $H_{2 \times 2}$, utiliza-se também a assim denominada *renormalização*, que consiste em adotar mais uma condição, para fixar o parâmetro arbitrário γ . Este vínculo adicional é o espaço médio unitário, que está relacionado ao processo de desdobramento do espectro:

$$\langle s \rangle = 1 . \quad (2.27)$$

Como resultado para a constante arbitrária, obtém-se o valor $\gamma = \frac{\pi}{2}$. A distribuição dos espaçamentos entre níveis, levando em consideração o valor do parâmetro γ , se escreve

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi s^2}{4}\right) \quad . \quad (2.28)$$

A figura a seguir exhibe as representações gráficas das distribuições dos espaçamentos entre níveis vizinhos, de Poisson no *Ensemble* Regular Gaussiano (2.2) e de Wigner no *Ensemble* Ortogonal Gaussiano (2.28). Essas duas distribuições são de uma importância fundamental no estudo do caos quântico.

Figura 9: Distribuições de Poisson e Wigner para os espaçamentos.

A figura 9 apresenta a distribuição dos espaçamentos de Poisson, que não apresenta repulsão entre os níveis. Enquanto que a distribuição dos espaçamentos de Wigner tem como característica a repulsão entre os níveis. Observa-se na figura 9 o comportamento linear próximo da origem.

2.2.4 Distribuição dos autovalores das matrizes

A distribuição de probabilidades dos autovalores para uma matriz 2x2, tendo em vista a invariância do traço (2.6) e a distribuição da matriz aleatória $P(H)$, é dado por

$$P(E_+, E_-) = \gamma e^{-\gamma(E_+^2 + E_-^2)} |E_+ - E_-| \quad . \quad (2.29)$$

No caso de uma matriz $H_{N \times N}$, a expressão analítica da distribuição dos autovalores é dada exatamente [8] pela expressão analítica

$$P(E_1, \dots, E_N) = C e^{-\alpha \text{tr} E^2} \prod_{j>i} |E_j - E_i| \quad . \quad (2.30)$$

Quando a ordem da matriz N assume valores crescentes, existe uma expressão muito simples para densidade de estados. Essa aproximação é obtida de várias maneiras. Adotaremos neste trabalho aquela que considera a idéia de campo médio [5]. Nesse caso, a distribuição dos autovalores é a função solução de uma equação integral⁵. Esta função solução é conhecida, em a Teoria das Matrizes Aleatórias por **semicírculo de Wigner**:

$$\bar{\rho}(E) = \begin{cases} \frac{2\alpha}{\pi} \sqrt{\frac{N}{\alpha} - E^2} & -\sqrt{\frac{N}{\alpha}} \leq E \leq \sqrt{\frac{N}{\alpha}} \\ 0 & E < -\sqrt{\frac{N}{\alpha}} \text{ ou } E > \sqrt{\frac{N}{\alpha}} \end{cases} \quad . \quad (2.31)$$

Os detalhes da idéia de campo médio serão colocadas mais adiante, ocasião em que será estudada a generalização da distribuição semicírculo de Wigner.

O gráfico do semicírculo mostra claramente o confinamento dos autovalores da matriz aleatória H .

Figura 10: Densidade de estados semicírculo de Wigner.

A figura 10 mostra a distribuição do semicírculo, para os autovalores de uma matriz de ordem $N = 200$. O parâmetro arbitrário α foi fixado pelo valor que é a metade da unidade, muito usado por E. Wigner.

⁵Esse método será usado no *Ensemble Ortogonal Generalizado* (capítulo IV).

2.2.5 Distribuição de probabilidade das componentes de um autovetor

Sejam c_1 e c_2 as componentes de um autovetor associado ao autovalor E_+ , no processo de diagonalização da matriz $H_{2 \times 2}$. Essas componentes são obtidas resolvendo o seguinte sistema

$$\begin{bmatrix} h_{11} - E_+ & h_{12} \\ h_{12} & h_{22} - E_+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} . \quad (2.32)$$

O sistema linear acima possui duas equações linearmente dependentes. Nesse caso impõe-se uma nova condição para as componentes. Uma das equações é escolhida no sistema (2.32), a outra é a normalização do autovetor

$$c_1^2 + c_2^2 = 1 . \quad (2.33)$$

Resolvendo essas duas equações, determina-se o valor de uma das componentes, por exemplo:

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{\left[\sqrt{\left(\frac{h_{22}-h_{11}}{2h_{12}} \right)^2 + 1} + \left(\frac{h_{22}-h_{11}}{2h_{12}} \right) \right]^2 + 1}} . \quad (2.34)$$

A distribuição da componente c_1 é obtida por meio da integral

$$P(c_1) = \int dH P(H) \delta \left\{ c_1 - \frac{1}{\sqrt{\left[\sqrt{\left(\frac{h_{22}-h_{11}}{2h_{12}} \right)^2 + 1} + \left(\frac{h_{22}-h_{11}}{2h_{12}} \right) \right]^2 + 1}} \right\} . \quad (2.35)$$

Usando em (2.35) a expressão analítica de $P(H)$ exibida em (2.26) e efetuando as integrações [9] devidas, obtém-se

$$P(c_1) = \frac{1}{\pi \sqrt{1 - c_1^2}} . \quad (2.36)$$

De maneira análoga ao procedimento em relação à distribuição de c_1 , obtém-se a distribuição da outra componente c_2

$$P(c_2) = \frac{1}{\pi \sqrt{1 - c_2^2}} . \quad (2.37)$$

As distribuições das componentes (2.36) e (2.37) são conhecidas na Teoria das Matrizes Aleatórias como: as distribuições de Porter-Thomas. Tais distribuições

podem ser obtidas percorrendo outro caminho, independente da distribuição da matriz $P(H)$. A distribuição

$$P(c_1, c_2) = \frac{1}{\pi} \delta(1 - c_1^2 - c_2^2) \quad (2.38)$$

é candidata à distribuição conjunta de ambas componentes c_1 e c_2 . Por outro lado, a definição dada em (2.38) revela a condição natural de normalização (2.33) do autovetor. A distribuição de uma das componentes do autovetor é obtida resolvendo a integral no segundo membro da igualdade

$$P(c_1) = \int dc_2 P(c_1, c_2) . \quad (2.39)$$

O resultado é a distribuição de Porter-Thomas (2.36) cuja sensibilidade poderá ser testada mais adiante, com a mudança da expressão analítica da entropia.

A normalização (2.33) fixa o tamanho do autovetor, mas a direção resulta arbitrária. A figura mostra apenas um vetor com direção arbitrária.

Figura 11: Simetria angular de um autovetor da matriz $H_{2 \times 2}$.

A distribuição de probabilidade angular é obtida se valendo da igualdade

$$P(c_1)dc_1 = P(\theta)d\theta . \quad (2.40)$$

Usando a expressão da distribuição $P(c_1)$, dada em (2.36), obtém-se

$$P(\theta) = \frac{1}{\pi} . \quad (2.41)$$

A probabilidade de se obter um autovetor $\vec{c}$, em um ângulo θ arbitrário é constante. Isso indica a existência de uma **simetria angular**.

A distribuição de uma componente de um autovetor para uma matriz aleatória de ordem N , é obtida explicitamente [2] e escrita por

$$P(c) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp\left(-\frac{N}{2}c^2\right) . \quad (2.42)$$

Portanto, trata-se de uma distribuição gaussiana.

~ o ~ • ~ o ~

Capítulo 3

Ensembles Generalizados de Matrizes Aleatórias

Utilizam-se, nesse capítulo, a entropia não-extensiva de Tsallis e os dois respectivos vínculos, convenientemente definidos. É possível estabelecer um procedimento geral para se obter as distribuições de probabilidades das matrizes aleatórias. Essas matrizes de ordem genérica N , podem ter os seus elementos números reais, números complexos ou quaternions. Contudo, com o objetivo de melhorar a compreensão, das semelhanças e das diferenças, existentes entre os *ensembles* construídos a partir das duas entropias, apresenta-se nesse capítulo uma construção detalhada do *Ensemble* Ortogonal Generalizado das matrizes de tamanho 2×2 .

3.1 Procedimento Geral

A entropia generalizada (1.2) é adaptada convenientemente para incluir a matriz aleatória H , assumindo a forma adequada

$$S_q = \frac{1 - \int dH P^q(H)}{q - 1} , \quad (3.1)$$

O parâmetro entrópico q é responsável pela não-extensividade da entropia [26, 27].

Um dos vínculos é a existência da normalização de $P(H)$:

$$\int dH P(H) = 1 . \quad (3.2)$$

O outro vínculo é a existência da "média" do traço de H^2 , em todo domínio de variação do parâmetro entrópico:

$$\int dH P^q(H) \text{tr} H^2 = \mu \int dH P^q(H) . \quad (3.3)$$

O valor μ passa a ser identificado como valor médio generalizado do traço da matriz H^2 .

Para utilizar a técnica do cálculo variacional, define-se uma função auxiliar F , de maneira análoga ao que foi feito anteriormente em (2.12)

$$F = \frac{1 - \int dHP^q}{q - 1} + \lambda_1 \left[\int dHP - 1 \right] + \lambda_2 \left[\int dHP^q \text{tr} H^2 - \mu \int dHP^q \right] . \quad (3.4)$$

Os parâmetros λ_1 e λ_2 são os multiplicadores de Lagrange. A variação desta função δF , após algumas manipulações matemáticas, resulta

$$\delta F = \int dH \delta P \left\{ \frac{q}{(1 - q)} P^{q-1} [-1 + \lambda_2 (q - 1) (\text{tr} H^2 - \mu)] + \lambda_1 \right\} . \quad (3.5)$$

Assume-se então a condição $\delta F_1 = 0$ e obtém-se a distribuição de probabilidade de uma matriz H

$$P(H) = \frac{1}{Z_q} [1 - (1 - q) \lambda_2 (\text{tr} H^2 - \mu)]^{\frac{1}{1-q}} . \quad (3.6)$$

Fazendo-se uma conveniente mudança em (3.6), definindo-se

$$\beta = \frac{\lambda_2}{1 + \mu (q - 1)} , \quad (3.7)$$

a expressão analítica da distribuição generalizada de uma matriz aleatória é simplificada para

$$P(H) = \frac{1}{Z_{q,\mu}} [1 - (1 - q) \beta \text{tr} H^2]^{\frac{1}{1-q}} . \quad (3.8)$$

A função de partição generalizada Z_q é englobada em uma nova função de partição generalizada $Z_{q,\mu}$, que é obtida, substituindo a distribuição de probabilidade de uma matriz (3.8), no primeiro vínculo (3.2)

$$Z_{q,\mu} = \int dH [1 - (1 - q) \beta \text{tr} H^2]^{\frac{1}{1-q}} \quad (3.9)$$

A existência da função de partição generalizada é verificada pela análise de convergência da integral (3.9). Nota-se que a distribuição de probabilidade de uma matriz aleatória em (3.8) tem validade para qualquer matriz constituída de elementos reais, complexos ou quaternions.

Substituindo-se a distribuição de probabilidade de uma matriz aleatória (3.8), na expressão analítica da entropia generalizada definida em (3.1), relaciona-se a entropia generalizada com a função de partição generalizada e o valor médio generalizado do traço da matriz H^2

$$S_q = \frac{1 - Z_q^{1-q}}{q-1} + \beta \bar{\mu} , \quad (3.10)$$

na qual

$$\bar{\mu} = \mu \int dH P^q(H) . \quad (3.11)$$

Define-se uma temperatura aleatória da mesma maneira que é feito no *Ensemble* Canônico, seja no formalismo da entropia de Boltzmann-Gibbs ou no formalismo da entropia não-extensiva

$$\frac{\partial S_q}{\partial \mu} = \frac{1}{T_H} . \quad (3.12)$$

Derivando parcialmente (3.10) e usando a definição (3.12), tem-se

$$\beta = \frac{1}{T_H} = \alpha . \quad (3.13)$$

Pela igualdade (3.13), o parâmetro β é identificado por uma nova variável α , que assume somente valores positivos. De agora em diante, fica estabelecido o sinal da constante α .

Derivando parcialmente a função de partição generalizada em (3.9), em relação a variável α , obtém-se o traço médio de H^2 , em termos da própria função de partição generalizada¹

$$\bar{\mu} = (q-1) Z_q^{q-1} \frac{\partial \ln Z_q}{\partial \alpha} . \quad (3.14)$$

Substituindo o valor do traço médio de H^2 (3.14), na expressão da entropia (3.10), resulta

$$S_q = \frac{1 - Z_q^{1-q}}{q-1} + \alpha (q-1) Z_q^{q-1} \frac{\partial \ln Z_q}{\partial \alpha} . \quad (3.15)$$

A função de partição generalizada tem um papel fundamental no cálculo dos valores médios das grandezas, como ficou demonstrado acima.

3.2 *Ensemble* Ortogonal Generalizado para $H_{2 \times 2}$

A generalização do *Ensemble* Ortogonal Gaussiano para uma matriz de ordem mínima $H_{2 \times 2}$, oferece uma grande vantagem que é a possibilidade de se efetuar todos os cálculos analiticamente. Com isso desperta-se uma intuição

¹Muda-se a notação da função de partição generalizada: $Z_{q,\mu} \rightarrow Z_q$, por uma questão de simplicidade.

para futuras modificações nas distribuições estatísticas para as matrizes $H_{N \times N}$. Lembrando-se também que no estudo das misturas quânticas, constantemente se faz uso do ensemble das matrizes de tamanho 2×2 .

3.2.1 Distribuição das matrizes aleatórias $H_{2 \times 2}$

A função de partição generalizada para matriz $H_{2 \times 2}$ (2.4) é obtida calculando a integral:

$$Z_q = \int \int \int dh_{11} dh_{22} dh_{12} [1 - (1 - q) \alpha (h_{11}^2 + h_{22}^2 + 2h_{12}^2)]^{\frac{1}{1-q}} \quad (3.16)$$

Fazendo a conveniente mudança de variável na integral anterior (3.16), $\bar{h}_{12} = \sqrt{2}h_{12}$, resulta:

$$Z_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \int \int \int dh_{11} dh_{22} d\bar{h}_{12} [1 - (1 - q) \alpha (h_{11}^2 + h_{22}^2 + \bar{h}_{12}^2)]^{\frac{1}{1-q}} \quad (3.17)$$

A visão geométrica do espaço dos elementos independentes da matriz $H_{2 \times 2}$ é apresentada na figura.

Figura 12: Espaço dos elementos independentes de $H_{2 \times 2}$.

Na transformação das variáveis $(h_{11}, h_{22}, \bar{h}_{12})$ nas novas variáveis (R, θ, φ) , tendo em vista a figura 12, os seus elementos de integração são bem definidos nos dois espaços, cuja correspondência é dada pela igualdade

$$dh_{11}dh_{22}d\bar{h}_{12} = R^2 dR d\Omega , \quad (3.18)$$

na qual $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ e também

$$h_{11}^2 + h_{22}^2 + \bar{h}_{12}^2 = R^2 . \quad (3.19)$$

Para realizar a integração em (3.17), levam-se em consideração os resultados em (3.18) e na equação (3.19). Integrando primeiramente nas variáveis angulares, resulta apenas uma integração na variável radial:

$$Z_q = 2\sqrt{2}\pi \int dR R^2 [1 - (1 - q) \alpha R^2]^{\frac{1}{1-q}} . \quad (3.20)$$

Os limites de integração estão ainda indefinidos, mas serão determinados após uma análise cuidadosa da convergência da integral. A escolha correta para os limites de integração vai depender do parâmetro entrópico q . Por isso, o estudo da função de partição generalizada será dividido em três casos possíveis: $q > 1$, $q < 1$ e $q = 1$.

Primeiro caso: $q > 1$

A função de partição generalizada (3.20) é convenientemente reescrita na forma

$$Z_q = 2\sqrt{2}\pi \int_0^R d\bar{R} \frac{\bar{R}^2}{[1 + (q - 1) \alpha \bar{R}^2]^{\frac{1}{q-1}}} . \quad (3.21)$$

As integrações são efetuadas sobre todo o espaço dos elementos independentes da matriz $H_{2 \times 2}$. Isso requer algum tipo de restrição sobre o parâmetro entrópico. Supondo a aproximação

$$(q - 1) \alpha \bar{R}^2 \gg 1 ; \quad (3.22)$$

nessa situação, a integral (3.21) é rapidamente calculada e o seu resultado é

$$Z_q \propto R^{\frac{3q-5}{q-1}} . \quad (3.23)$$

A função de partição generalizada terá um valor finito, se o parâmetro entrópico q assumir valores que satisfaçam a inequação

$$\frac{3q - 5}{q - 1} < 0 . \quad (3.24)$$

Resolvendo a inequação (3.24) determina-se o domínio de variação do parâmetro entrópico q :

$$1 < q < 1 + \frac{2}{3} . \quad (3.25)$$

Nesse intervalo (3.25) a função de partição tem sua existência garantida. Consequentemente garante-se também a existência da normalização de $P(H)$. A função de partição generalizada é calculada pela equação

$$Z_q = 2\sqrt{2}\pi \int_0^\infty dR \frac{R^2}{[1 + (q-1)\alpha R^2]^{\frac{1}{q-1}}} . \quad (3.26)$$

A integral (3.26) pode ser resolvida fazendo inicialmente uma mudança de variável conveniente

$$R^2 = \sqrt{\frac{u}{(q-1)\alpha}} . \quad (3.27)$$

A função de partição (3.26) é modificada, levando em consideração a mudança anterior (3.27) e vale

$$Z_q = \frac{\sqrt{2}}{[(q-1)\alpha]^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty du \frac{u^{\frac{1}{2}}}{(1+u)^{\frac{1}{q-1}}} . \quad (3.28)$$

Usando uma das definições da função beta na forma integral, inserida no apêndice (8.1), determina-se a função de partição generalizada:

$$Z_q = \frac{\pi\sqrt{2}B\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{q-1} - \frac{3}{2}\right)}{(q-1)^{\frac{3}{2}}} \alpha^{-\frac{3}{2}} . \quad (3.29)$$

Substituindo a distribuição de probabilidade de uma matriz $H_{2 \times 2}$ (3.8), no segundo vínculo (3.3) e fazendo a mesma análise de aproximação que foi feita para a integral na equação (3.21), chega-se à conclusão de que a média generalizada do traço de H^2 (2.11) tem sua existência garantida no intervalo de variação (3.25) do parâmetro entrópico q .

Segundo caso: $q < 1$

Nesse intervalo de variação do parâmetro entrópico q , a função de partição generalizada (3.20) já se encontra escrita de maneira ideal. É necessário um estudo da função que está no integrando em (3.20) para determinar os limites de integração. A parte importante do integrando, usada para uma análise matemática, é a função $I(R)$, base da função potência que tem o expoente $\frac{1}{1-q}$:

$$I(R) = 1 - (1-q)\alpha R^2 . \quad (3.30)$$

A representação gráfica da igualdade (3.30) é uma parábola, com concavidade bem definida.

Figura 13: Gráfico da função $I(R)$ com raio de corte unitário.

A figura 13 mostra o gráfico da função $I(R)$, que assume valores positivos no intervalo $[0, R_c]$, em que R_c é o raio de corte. Para valores de R maiores que o raio de corte, a função $I(R)$ assume somente valores negativos.

Para que o integrando $[I(R)]^{\frac{1}{1-q}}$ tenha existência no conjunto dos números reais, seja qual for o valor, que o parâmetro entrópico assuma nesse domínio é necessário que R satisfaça a condição

$$I(R) > 0 . \quad (3.31)$$

Dessa maneira, a variação de R ocorre entre zero e um raio de corte finito, como pode ser observado na figura 13. O raio de corte R_c é a raiz positiva da função $I(R)$ dada por

$$R_c = \frac{1}{\sqrt{(1-q)\alpha}} . \quad (3.32)$$

Tendo definido os limites de integração, a função de partição generalizada pode ser calculada por meio da integral

$$Z_q = 2\sqrt{2}\pi \int_0^{R_c} dR R^2 [1 - (1-q)\alpha R^2]^{\frac{1}{1-q}} . \quad (3.33)$$

Resolve-se a integral (3.33) fazendo-se a conveniente mudança de variável

$$R = \frac{t^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{(1-q)\alpha}} . \quad (3.34)$$

A função de partição generalizada (3.33) na nova variável t é dada por

$$Z_q = \frac{\pi\sqrt{2}}{[(1-q)\alpha]^{\frac{3}{2}}} \int_0^1 dt t^{\frac{1}{2}} (1-t)^{\frac{1}{1-q}} . \quad (3.35)$$

A integral na igualdade (3.35) é identificada com a função beta, listada no apêndice (fórmula 8.2). A função de partição generalizada tem sua expressão matemática simplificada

$$Z_q = \frac{\pi\sqrt{2}B(\frac{3}{2}, 1 + \frac{1}{1-q})}{(1-q)^{\frac{3}{2}}} \alpha^{-\frac{3}{2}} . \quad (3.36)$$

Terceiro caso: $q=1$

Nesse caso limite, a distribuição de probabilidade de uma matriz aleatória $H_{2 \times 2}$ pode ser obtida, fazendo um estudo assintótico da distribuição de probabilidade da matriz e da função de partição generalizada, na vizinhança do valor unitário de q .

Para uma análise rápida, estuda-se o limite diretamente na integral (3.26)

$$\lim_{q \rightarrow 1^+} Z_q = 2\pi\sqrt{2} \int_0^\infty dR R^2 \lim_{q \rightarrow 1^+} \exp \left\{ \frac{\ln [1 - (1-q)\alpha R^2]}{1-q} \right\} . \quad (3.37)$$

Levantando a indeterminação do tipo $\frac{0}{0}$ em (3.37) no argumento da exponencial, seguido de uma integração, resulta

$$\lim_{q \rightarrow 1^+} Z_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{3}{2}} . \quad (3.38)$$

Este resultado pode ser comparado, ao valor inverso da constante, que multiplica a exponencial gaussiana em (2.13).

Outra maneira de obter o limite (3.38) é usar a aproximação da fórmula de Stirling ([12, 1]) diretamente nos resultados (3.29) ou (3.36).

No domínio $q < 1$, o raio de corte R_c (3.32) satisfaz o limite

$$\lim_{q \rightarrow 1^-} R_c \rightarrow \infty . \quad (3.39)$$

Como o limite superior da integral em (3.33) está bem determinado, procede-se de maneira análoga a que foi usada para determinar a função de partição generalizada (3.37). Prova-se então

$$\lim_{q \rightarrow 1^-} Z_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{3}{2}} . \quad (3.40)$$

Logo, de acordo com os resultados obtidos anteriormente em (3.38) e (3.40), conclui-se

$$\lim_{q \rightarrow 1} Z_q = Z , \quad (3.41)$$

em que Z pode ser interpretado como uma função de partição gaussiana

$$Z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{3}{2}} . \quad (3.42)$$

Assim escreve-se a distribuição de probabilidades generalizada (3.7), de forma mais conveniente para o estudo do limite

$$\lim_{q \rightarrow 1^\pm} P(H) = \frac{1}{Z} \lim_{q \rightarrow 1^\pm} \exp \left\{ \frac{\ln [1 - (1 - q) \alpha tr H^2]}{1 - q} \right\} . \quad (3.43)$$

Levantando a indeterminação no argumento da exponencial, obtém-se exatamente a expressão já conhecida no GOE (2.13).

Um resumo do que foi discutido para matriz $H_{2 \times 2}$ é apresentado na tabela.

Parâmetro Entrópico	Função de Partição Z_q	Densidade de Probabilidade
$]1, \frac{5}{3}[$	$\frac{\pi \sqrt{2} B(\frac{3}{2}, \frac{1}{q-1} - \frac{3}{2})}{(q-1)^{\frac{3}{2}}} \alpha^{-\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{Z_q [1 + (q-1) \alpha tr H^2]^{\frac{1}{q-1}}}$
$] -\infty, 1[$	$\frac{\pi \sqrt{2} B(\frac{3}{2}, 1 + \frac{1}{q-1})}{(1-q)^{\frac{3}{2}}} \alpha^{-\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{Z_q} [1 - (1 - q) \alpha tr H^2]^{\frac{1}{1-q}}$
$q = 1$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{Z_q} \exp(-\alpha tr H^2)$

Tabela 2: Resultados das densidades de probabilidade de uma matriz $H_{2 \times 2}$.

As funções betas na tabela 2 podem ser exibidas por meio das funções gamas.

3.2.2 Distribuição de espaçamentos nos domínios de q

Usando os resultados encontrados para a densidade de probabilidade de uma matriz aleatória $H_{2 \times 2}$, dados na tabela 2, calcula-se as distribuições dos espaçamentos entre níveis quantizados vizinhos. Para isso, utiliza-se a expressão matemática dada em (2.25). Esses cálculos podem ser feitos, considerando os dois domínios de variação do parâmetro entrópico: $q < 1$ e $1 < q < \frac{5}{3}$.

Primeiro domínio: $1 < q < \frac{5}{3}$.

Para que o estudo das distribuições dos espaçamentos entre os níveis seja entendido de maneira completa, primeiramente, é preciso obter a expressão analítica teórica; mas também é necessário uma simulação computacional para verificação direta do ajuste. Para isto é imprescindível obter a distribuição de um elemento da matriz $H_{2 \times 2}$.

Expressão Analítica Teórica da Distribuição dos Espaçamentos: Para obter as distribuições dos espaçamentos, calcula-se a integral

$$P(s) = \frac{1}{Z_q} \int \int \int dh_{11} dh_{22} dh_{12} \frac{\delta \left[s - \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2} \right]}{[1 + (q-1) \alpha (h_{11}^2 + h_{22}^2 + 2h_{12}^2)]^{\frac{1}{q-1}}} . \quad (3.44)$$

Fazendo a mudança de variável $(h_{11}, h_{22}) \rightarrow (x, y)$, definida pela transformação

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{11} \\ h_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x \\ 2y \end{bmatrix} . \quad (3.45)$$

Desta forma, a integral (3.44) sofre a modificação

$$P(s) = \frac{2}{Z_q} \int \int \int dh_{12} dx dy \frac{\delta \left(s - \sqrt{4y^2 + 4h_{12}^2} \right)}{[1 + (q-1) \alpha (2x^2 + 2y^2 + 2h_{12}^2)]^{\frac{1}{q-1}}} , \quad (3.46)$$

fazendo nova mudança de variável: $(h_{12}, y) \rightarrow (r, \theta)$, na qual r e θ são as coordenadas polares no plano. Rapidamente duas integrações são efetuadas nessas coordenadas, restando apenas uma única integração na coordenada x :

$$P(s) = \frac{\pi}{Z_q} s \int_0^\infty \frac{dx}{[1 + (q-1) \alpha (2x + \frac{s^2}{2})]^{\frac{1}{q-1}}} . \quad (3.47)$$

Observa-se em (3.47) o aparecimento natural do termo linear na variável s , devido à própria transformação efetuada. Esse termo caracteriza a repulsão entre os níveis vizinhos quantizados.

A integral (3.47) é uma função Beta, podendo ser colocada na forma listada no apêndice (equação 8.1). Levando em consideração a expressão da função de partição (3.29), tem-se a distribuição dos espaçamentos

$$P(s) = \frac{\alpha (5 - 3q)}{2} s \left[1 + \frac{(q-1) \alpha s^2}{2} \right]^{\frac{1}{2} - \frac{1}{q-1}} . \quad (3.48)$$

Nota-se em (3.48) que a nova entropia não altera a repulsão entre os níveis. Essa repulsão é confirmada pela existência do fator linear em s .

É possível realizar um estudo da convergência da distribuição dos espaçamentos entre os níveis vizinhos, no caso limite em que o parâmetro entrópico assume o valor unitário. Para essa análise, escreve-se (3.48) valendo-se da forma exponencial. Tomando o limite, fica evidente a necessidade de levantar a indeterminação do tipo $\frac{0}{0}$, no argumento da gaussiana

$$\lim_{q \rightarrow 1^+} P(s) = \alpha s \lim_{q \rightarrow 1^+} \exp \left\{ -\frac{\ln \left[1 + \frac{(q-1)\alpha s^2}{2} \right]}{q-1} \right\}. \quad (3.49)$$

O resultado deste limite é justamente a distribuição dos espaçamentos, já obtida anteriormente (2.26), no formalismo da entropia de Boltzmann-Gibbs-Shannon.

Espaçamento médio unitário: Observa-se em (3.48) que o valor de α é arbitrário. Inicialmente esse valor pode ser fixado adotando um espaçamento médio, definido por

$$\int ds s P(s) = \langle s \rangle. \quad (3.50)$$

Substituindo (3.48) em (3.50), tem-se

$$\langle s \rangle = \frac{(5-3q)}{2} \alpha \int_0^\infty ds s^2 \left[1 + (q-1) \frac{\alpha s^2}{2} \right]^{\frac{1}{2} - \frac{1}{q-1}}. \quad (3.51)$$

Para que o espaçamento varie dentro dos limites de integração e a integral (3.51) tenha existência assegurada, o parâmetro entrópico deve ficar restringido em um novo intervalo:

$$1 < q < \frac{3}{2}. \quad (3.52)$$

Fazendo a mudança de variável em (3.51)

$$u = \frac{\alpha(q-1)s^2}{2}. \quad (3.53)$$

Dessa maneira, a função Beta (8.1) é observada com transparência. Adotando $\langle s \rangle = 1$, o valor de α é

$$\alpha = \frac{(5-3q)^2 B\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{q-1} - 2\right)}{2(q-1)^3}. \quad (3.54)$$

Expressando a função Beta em termos da função Gama

$$\alpha(q-1) = \frac{\pi}{2} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} - 2\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} - \frac{3}{2}\right)} \right]^2. \quad (3.55)$$

Levando em consideração o valor do parâmetro arbitrário α dado em (3.55), a distribuição de espaçamento entre níveis vizinhos dado em (3.48), tem sua representação gráfica exibida a seguir para alguns valores de q . O gráfico da distribuição de Wigner (2.28) é apresentada na mesma figura para comparações pertinentes.

Figura 14: Distribuição dos espaçamentos entre níveis: $\langle s \rangle = 1$.

A figura 14 mostra os gráficos das distribuições dos espaçamentos $P(s)$ para $q \in]1, \frac{3}{2}[$. Além disso, duas observações sobre os gráficos desenhados na figura 14 podem ser destacadas. Primeiramente, nota-se que o gráfico da distribuição dos espaçamentos $P(s)$ tende para a distribuição de Wigner (GOE), no limite em que o parâmetro entrópico q assume valores cada vez mais próximos da unidade. Em segundo lugar, a figura 14 também mostra o crescimento ilimitado da amplitude máxima de $P(s)$, quando o parâmetro entrópico se aproxima do valor $q = \frac{3}{2}$. O espaçamento ($s_{máx}$) no ponto de máximo de $P(s)$ é dado por

$$s_{máx} = \frac{1}{\sqrt{\alpha(2-q)}}. \quad (3.56)$$

Sabendo-se que o valor de α cresce ilimitadamente em $q = \frac{3}{2}$, conseqüentemente, o valor do espaçamento máximo tende para zero

$$\lim_{q \rightarrow \frac{3}{2}} s_{máx} = 0. \quad (3.57)$$

Para o espaçamento no ponto máximo dado em (3.56), o valor da distribuição dos espaçamentos vale

$$P(s_{máx}) = \frac{(5-3q)(2-q)^{\frac{1}{q-1}-1}}{2} \sqrt{\alpha} . \quad (3.58)$$

Tendo em vista a igualdade (3.58) e sabendo-se que $\alpha(q)$ diverge quando $q \rightarrow \frac{3}{2}$, tem-se o limite

$$\lim_{q \rightarrow \frac{3}{2}} P(s_{máx}) = \infty . \quad (3.59)$$

Os resultados dos limites (3.57) e (3.59) indicam que a distribuição dos espaçamentos para $q \rightarrow \frac{3}{2}$ tende para o valor nulo, para qualquer valor do espaçamento diferente de zero. Por outro lado, as repulsões entre os níveis implicam $P(0) = 0$. Adota-se esse valor para $q = \frac{3}{2}$, removendo a divergência.

A igualdade (3.55) fixa o valor de α , mas ficam excluídas aquelas distribuições normalizadas determinadas pelo parâmetro entrópico q no intervalo $\left] \frac{3}{2}, \frac{5}{3} \right[$. Mesmo assim é possível representar graficamente as distribuições dos espaçamentos $P(s)$, nesse intervalo. Para isso, basta substituir a função Gama do numerador em (3.55), pela representação da função Gama, válida para os argumentos negativos². O valor de α é modificado para

$$\alpha(q-1) = \frac{\pi}{2} \left[\frac{\pi}{\text{sen}(\pi z) \Gamma(1-z) \Gamma\left(\frac{1}{q-1} - \frac{3}{2}\right)} \right]^2 , \quad (3.60)$$

na qual $z = \frac{1}{q-1} - 2$. O gráfico de α em todo domínio do parâmetro entrópico q está na figura.

Figura 15: Gráfico de α em função de q .

²Vide equação (8.4) no apêndice.

A figura 15 mostra o gráfico de $\alpha(q)$ se aproximando do valor $\alpha = \frac{\pi}{2}$, já obtido anteriormente no GOE. Para o valor de $q \rightarrow \frac{3}{2}$, a função $\alpha(q)$ apresenta uma divergência. Se o parâmetro entrópico se aproxima do valor $q = \frac{5}{3}$, então a função $\alpha \rightarrow 0$.

Para usar o valor de α em (3.60) é necessário considerar a convergência da integral em (3.51). Após identificar essa integral com a função Beta, esta é representada por meio das funções Gama³. Usa-se então a extensão analítica da função Gama para argumentos negativos. Esse artifício permite exibir os gráficos das distribuições dos espaçamentos, no intervalo $\left] \frac{3}{2}, \frac{5}{3} \right[$ de variação do parâmetro entrópico.

Figura 16: Distribuição dos espaçamentos $P(s)$.

Observa-se na figura 16 que as distribuições dos espaçamentos têm um valor ilimitado para sua amplitude máxima, no limite $q \rightarrow \frac{3}{2}$.

Número real finito para o valor de α : Quando o parâmetro α assumir um valor real qualquer, por exemplo, a metade da unidade, então todas as distribuições dos espaçamentos entre os níveis vizinhos $P(s)$ podem ser exibidas simultaneamente.

³Vide equação (8.5) no apêndice.

Figura 17: Distribuição dos espaçamentos $P(s)$ no intervalo $\left]1, \frac{5}{3}\right[$.

A figura 17 mostra algumas distribuições dos espaçamentos entre os níveis vizinhos, na qual o parâmetro entrópico varia em todo o domínio $\left]1, \frac{5}{3}\right[$. Con-vém observar que o espaçamento médio é uma função do parâmetro entrópico q . Observa-se que nesse caso o espectro não se encontra desdobrado.

Espaçamento quadrático médio: O espaçamento quadrático médio $\langle s^2 \rangle$ é calculado por meio da integral

$$\langle s^2 \rangle = \int_0^{\infty} ds s^2 P(s). \quad (3.61)$$

Substituindo a expressão analítica da distribuição de Wigner $P(s)$, que pertence ao *Ensemble* Ortogonal Gaussiano (2.26), na igualdade (3.61), o resultado da integração é dado por

$$\langle s^2 \rangle = \frac{2}{\gamma}. \quad (3.62)$$

Substituindo o valor $\gamma = \frac{\pi}{2}$ obtido com a condição de que o espaçamento médio assuma o valor unitário na equação (3.62), o resultado para o valor do espaçamento quadrático médio vale

$$\langle s^2 \rangle = \frac{4}{\pi}. \quad (3.63)$$

Substituindo a distribuição de espaçamentos $P(s)$ dada pela igualdade (3.48), pertencente ao novo *Ensemble* Ortogonal Generalizado (GOE-q), na igualdade (3.61), tem-se explicitamente

$$\langle s^2 \rangle = \frac{(5-3q)\alpha}{2} \int_0^\infty ds \frac{s^3}{\left[1 + \frac{(q-1)\alpha}{2}s^2\right]^{\frac{1}{2}-\frac{1}{q-1}}} . \quad (3.64)$$

Para os grandes valores do espaçamento s , a integral em (3.64) tem sua convergência garantida, se o parâmetro entrópico q variar em um intervalo mais restrito $[1, \frac{7}{5}]$. A integração pode ser efetuada e o resultado obtido vale

$$\langle s^2 \rangle = \frac{4}{(7-5q)\alpha} . \quad (3.65)$$

A função $\alpha(q)$ tem um comportamento suave no intervalo $[1, \frac{7}{5}]$. Observa-se na igualdade (3.65) que o espaçamento quadrático médio possui uma divergência

$$\lim_{q \rightarrow \frac{7}{5}} \langle s^2 \rangle = \infty . \quad (3.66)$$

O gráfico do espaçamento quadrático médio $\langle s^2 \rangle$ em função do parâmetro entrópico q mostra a restrição do domínio de variação do parâmetro entrópico q .

Figura 18: Espaçamento quadrático médio em função do parâmetro entrópico.

A figura 18 mostra o gráfico do espaçamento quadrático médio aproximar-se do valor $\sigma = 1,273$ enquanto $q \rightarrow 1^+$. Esse valor é uma aproximação até a terceira casa decimal do valor $\langle s^2 \rangle = \frac{4}{\pi}$, resultado já obtido no GOE (3.63). Para o valor $q \rightarrow \frac{7}{5}$, o espaçamento quadrático médio assume valores crescentes ilimitados, ou seja, o espaçamento quadrático médio apresenta uma divergência nesse ponto. Para os valores de q variando no intervalo $]\frac{7}{5}, \frac{5}{3}[$, o espaçamento

quadrático médio assume valores negativos, de acordo com a igualdade (3.65). Esses valores não serão considerados no presente trabalho.

Variância (σ^2) : A variância σ^2 é a diferença entre o espaçamento quadrático médio e o quadrado do espaçamento médio

$$\sigma^2 = \langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2 . \quad (3.67)$$

Substituindo o valor do espaçamento médio $\langle s \rangle = 1$ e o valor do espaçamento quadrático médio (3.65), na definição do quadrado da variância, o resultado obtido pode ser evoluído para se obter o valor do desvio

$$\sigma = \sqrt{\frac{4}{(7-5q)\alpha} - 1} . \quad (3.68)$$

O gráfico a seguir mostra o comportamento do desvio em função do parâmetro entrópico q .

Figura 19: Gráfico da variância em função do parâmetro entrópico.

A figura 19 mostra o comportamento do desvio em função do parâmetro entrópico q , respeitando as restrições impostas pela própria existência do espaçamento quadrático médio. Em primeiro lugar, nota-se que o gráfico do desvio se aproxima do valor $\sigma = \sqrt{\frac{4-\pi}{\pi}}$, valor este, já obtido anteriormente no GOE. O desvio também apresenta uma divergência em $q = \frac{7}{5}$.

Uma possível visualização geométrica do desvio é fazer uma correspondência entre seu valor e o tamanho de um segmento de reta. A figura a seguir exhibe esse intervalo no GOE.

Figura 20: Interpretação geométrica da variância.

A figura 20 mostra a distribuição de Wigner para os espaçamentos entre níveis vizinhos. O tamanho do segmento geométrico mostrado nessa mesma figura é igual ao valor do desvio. Observa-se que esse segmento geométrico tem um dos seus pontos extremo, em uma reta (vermelho pontilhado) centrada em $s = 1$. Sua única altura em relação ao eixo horizontal é bem determinada.

O desvio (3.68) calculada no GOE- q tem a mesma interpretação geométrica usada para o GOE.

Figura 21: Visualização geométrica de σ no GOE- q .

A figura 21 mostra alguns segmentos geométricos, que têm correspondência com um desvio calculado para um valor particular do parâmetro entrópico q .

Com esses segmentos é possível intuir o seu crescimento ilimitado, conforme o parâmetro entrópico se aproxima do valor $q = \frac{7}{5}$. Enquanto isso, observa-se que a altura do segmento em relação ao eixo horizontal se aproxima de zero.

Segundo domínio: $q < 1$

Para se obter a distribuição dos espaçamentos entre os níveis vizinhos nesse domínio de variação do parâmetro entrópico, considera-se a igualdade (3.44), modificada convenientemente para

$$P(s) = \frac{1}{Z_q} \int \int \int dh^3 \delta \left[s - \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + h_{12}^2} \right] \left[1 - (1 - q) \alpha tr H^2 \right]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (3.69)$$

A função de partição generalizada Z_q em (3.69) tem seu valor estabelecido na igualdade (3.36). O resultado das integrações em (3.69) é a distribuição dos espaçamentos entre os níveis vizinhos, para esse domínio de q :

$$P(s) = \frac{(5 - 3q)}{2} \alpha s \left[1 - \frac{(1 - q) \alpha}{2} s^2 \right]^{\frac{1}{2} + \frac{1}{1-q}}. \quad (3.70)$$

Os espaçamentos podem variar somente entre seu valor nulo e um espaçamento de corte, na distribuição dos espaçamentos em (3.70). O espaçamento de corte é matematicamente dado pela igualdade

$$s_c = \frac{1}{\sqrt{(1 - q) \alpha}}. \quad (3.71)$$

O valor de α pode ser fixado pelo espaçamento médio.

Espaçamento médio unitário: O espaçamento médio é obtido, substituindo a distribuição dos espaçamentos dado em (3.70), na definição do espaçamento médio dado em (3.50). Se o valor do espaçamento médio assumir o valor unitário, o valor de α é dado pela igualdade

$$\beta = (1 - q) \alpha = \frac{\pi}{8} \frac{(5 - 3q)^2}{(1 - q)^2} \left[\frac{\Gamma \left(\frac{3}{2} + \frac{1}{(1-q)} \right)}{\Gamma \left(3 + \frac{1}{1-q} \right)} \right]^2. \quad (3.72)$$

Usando a representação da função Beta em termos das funções Gama⁴, o resultado em (3.72) é simplificado para

$$\beta = \frac{\pi}{2} \left[\frac{\Gamma \left(\frac{5}{2} + \frac{1}{(1-q)} \right)}{\Gamma \left(3 + \frac{1}{1-q} \right)} \right]^2. \quad (3.73)$$

⁴Vide igualdade (8.5) no apêndice.

O gráfico de β em função do parâmetro entrópico q está na figura a seguir.

Figura 22: Gráfico de α em função do parâmetro entrópico q .

Observa-se na figura 22 que o gráfico de α se aproxima do seu valor obtido no GOE, enquanto o parâmetro entrópico se aproxima da unidade. Se o parâmetro entrópico q assumir valores cada vez mais negativos, α aproxima-se de zero. Prova-se matematicamente que são diferentes os valores de α , calculados nas igualdades (3.60) e (3.72), quando o parâmetro varia em todo seu domínio.

Os gráficos da distribuição dos espaçamentos $P(s)$, para alguns valores de q , levando em consideração o valor de α em (3.72), estão na figura:

Figura 23: Distribuição dos espaçamentos entre níveis vizinhos: $q < 1$.

Observa-se na figura 23 a convergência da distribuição dos espaçamentos, que se aproxima da distribuição de Wigner, quando o parâmetro entrópico varia no sentido do seu valor unitário. Conforme o parâmetro entrópico varia no sentido de um valor ilimitadamente negativo, a distribuição dos espaçamentos converge para

$$P(s) = 3 \left(\frac{3\pi}{16} \right)^2 s \sqrt{1 - \left(\frac{3\pi}{16} \right)^2 s^2} . \quad (3.74)$$

O espaçamento de corte nesse caso é dado por: $s_c = \frac{16}{3\pi}$.

3.2.3 Distribuição dos elementos da matriz $H_{2 \times 2}$

A distribuição de probabilidade de um elemento da matriz $H_{2 \times 2}$ é obtido integrando a distribuição de probabilidade da matriz, em todas as variáveis, exceto uma delas. Por exemplo, para um elemento independente da diagonal da matriz $H_{2 \times 2}$

$$P(h_{11}) = \int \int dh_{22} dh_{12} P(h_{11}, h_{22}, h_{12}) . \quad (3.75)$$

É necessário estudar as características estatísticas nos dois domínios do parâmetro entrópico.

Primeiro domínio: $1 < q < \frac{5}{3}$.

Substitui-se a distribuição de probabilidade (3.8) de uma matriz $H_{2 \times 2}$, na integral (3.75). Considerando-se a respectiva função de partição generalizada em (3.29), tem-se a expressão analítica explícita para a distribuição de um elemento da matriz

$$P(h_{11}) = \frac{\sqrt{\frac{\alpha(q-1)}{\pi}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}-1\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}-\frac{3}{2}\right)}}{[1 + \alpha(q-1) h_{11}^2]^{\frac{2-q}{q-1}}} . \quad (3.76)$$

A distribuição de outro elemento da diagonal principal da matriz tem sua expressão analítica análoga àquela dada em (3.76). A distribuição do elemento da matriz, fora da diagonal principal, é semelhante à distribuição (3.76), mas é necessário uma correção, por meio de uma mudança de variável na integral (3.75).

Usa-se o valor de α em que o espaçamento médio é unitário (3.55). Quando for necessário ($q > \frac{3}{2}$) usa-se a sua extensão analítica (3.60). O gráfico da distribuição do elemento da matriz está na figura a seguir.

Figura 24: Gráfico da distribuição de um elemento da matriz.

Observa-se na figura 24 que as distribuições, cujos valores do parâmetro entrópico q tendem para o valor unitário, convergem para a distribuição prevista no GOE. Outra característica dessas distribuições visualizada diretamente na figura 24 é o fato de seu decaimento assintótico tornar-se mais acentuado, enquanto o parâmetro entrópico varia no sentido de $q \rightarrow \frac{3}{2}^-$. Como a área é fixa, os valores máximos das distribuições aumentam, enquanto o valor do parâmetro entrópico tende para o limite $q \rightarrow \frac{3}{2}^-$. Esses valores máximos diminuem, enquanto o parâmetro entrópico varia no intervalo $\left] \frac{3}{2}, \frac{5}{3} \right[$. Nesse intervalo usa-se para α o valor definido em (3.60).

Figura 25: Decaimento assintótico de uma lei do tipo potência.

A figura 25 apresenta os mesmos gráficos da figura 24. Os valores assumidos pelo elemento da matriz estão restritos ao intervalo $[1, 3]$. As distribuições apresentam um decaimento assintótico do tipo potência (PL).

Escreve-se a distribuição de um elemento da matriz em uma forma mais simplificada e genérica:

$$P(h_{11}) = C_q \frac{\sqrt{\beta}}{(1 + \beta h_{11}^2)^{v+\frac{1}{2}}} . \quad (3.77)$$

A constante multiplicativa é função de q e $\nu = \frac{1}{q-1} - \frac{3}{2}$:

$$C_q = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} - 1\right)}{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{1}{q-1} - \frac{3}{2}\right)} . \quad (3.78)$$

O parâmetro β é definido por uma mudança de variável: $\beta = \alpha(q-1)$. A função multiplicativa C_q (3.78) é definida em todo intervalo de variação de q .

Realiza-se uma transformada de Fourier⁵ da distribuição do elemento da matriz (3.77). A expressão integral obtida é identificada com a função de Bessel modificada⁶. Apresenta-se essa função de Bessel por meio de uma subtração de duas funções de Bessel modificadas na forma de série⁷. O resultado dessa diferença depende do intervalo de variação do parâmetro ν . A tabela a seguir apresenta todos os resultados obtidos das análises, incluindo as respectivas antitransformadas.

ν	q	Transformada de Fourier aproximada $F(\gamma)$	Antitransformada de Fourier
$]1, \infty[$	$]1, \frac{7}{5}[$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{4\beta(\nu-1)}\gamma^2}$	$\sqrt{\frac{\beta(\nu-1)}{\pi}} e^{-\beta(\nu-1)h_{11}^2}$
$]0, 1[$	$] \frac{7}{5}, \frac{5}{3}[$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\Gamma(1-\nu)}{\Gamma(1+\nu)(4\beta)^\nu} \gamma^{2\nu}}$	$\frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\gamma \cos(\gamma h_{11}) e^{-\frac{\Gamma(1-\nu)}{\Gamma(1+\nu)(4\beta)^\nu} \gamma^{2\nu}}$

Tabela 3: Transformadas de Fourier aproximadas e suas antitransformadas.

O parâmetro ν é calculado por meio da igualdade: $\nu = \frac{1}{q-1} - \frac{3}{2}$. Os seus dois intervalos de variação são mostrados na primeira coluna da tabela 3. Os respectivos intervalos de variação do parâmetro entrópico estão posicionados na segunda coluna. A transformada de Fourier aproximada está na terceira coluna e é obtida considerando os termos dominantes, na diferença entre as funções de Bessel modificada. Calculando a antitransformada dessas funções exponenciais,

⁵Vide igualdade (8.6) no apêndice.

⁶Vide igualdade (8.7) no apêndice.

⁷Vide as igualdades (8.8) e (8.9) no apêndice.

têm-se as distribuições de um elemento da matriz, nos respectivos intervalos de variação do parâmetro entrópico. O resultado está na quarta coluna da tabela 3. A função definida por uma integral nessa coluna é conhecida como **distribuição de Lévy**⁸. Alguns aspectos dessas funções aproximadas podem ser visualizados tendo em vista as representações gráficas, nos intervalos de variação do parâmetro entrópico. É possível um estudo da diferença entre a distribuição do tipo lei de potência e a sua respectiva distribuição aproximada, na vizinhança de alguns valores do parâmetro entrópico, por exemplo, em torno da unidade.

Figura 26: Lévy, PL e suas diferenças no limite $q \rightarrow 1^+$.

A figura 26(a) mostra a convergência da diferença entre a distribuição PL e a distribuição gaussiana aproximada. Quando o valor do parâmetro entrópico se aproxima da unidade, a função diferença se aproxima da função nula. Conforme o parâmetro entrópico se afasta do seu valor unitário, as diferenças entre as distribuições sofrem acréscimos. A figura 26(b) mostra os gráficos da distribuição de um elemento da matriz do tipo lei de potência e a distribuição gaussiana aproximada. Observa-se nos gráficos que existem diferenças entre elas. Isso é natural pois a distribuição gaussiana foi obtida após algumas aproximações.

⁸O *ensemble* das matrizes de Lévy está divulgado na referência [15].

Figura 27: PL, Lévy e suas diferenças no limite $q \rightarrow \frac{7}{5}^-$.

A figura 27(a) contém os gráficos da diferença entre as distribuições para três valores do parâmetro entrópico. Enquanto o parâmetro entrópico assume valores no limite $q \rightarrow \frac{7}{5}^-$, as diferenças entre as distribuições aumentam em todos os pontos. A figura 27(b) mostra a distribuição de um elemento da matriz e sua respectiva distribuição gaussiana aproximada. Quando a variação do parâmetro entrópico ocorre no limite $q \rightarrow \frac{7}{5}^+$, a distribuição aproximada é agora a distribuição de Lévy. Novamente compara-se por meio das diferenças entre as distribuições PL e a Lévy aproximada.

Figura 28: Diferença entre PL e Lévy: $q \in \left[\frac{7}{5}, \frac{3}{2} \right]$.

A figura 28 exibe a variação da diferença entre a distribuição do tipo lei de potência e a respectiva distribuição de Lévy. Observa-se que enquanto o parâmetro entrópico se aproxima do limite $q \rightarrow \frac{7}{5}^+$, as diferenças aumentam próximas da origem ou em outro ponto qualquer mais afastado. Por outro lado, é possível observar na figura 28 o decréscimo da diferença entre as distribuições no limite $q \rightarrow \frac{3}{2}^-$. Nesse limite a distribuição de um elemento da matriz, que obedece a um decaimento do tipo potência, aproxima-se da distribuição de Lévy em todos os pontos. Importante é observar que nesse intervalo tanto as distribuições do tipo potência quanto a distribuição de Lévy estão normalizadas. As variâncias das distribuições do tipo potência (3.77) e das distribuições dos espaçamentos (3.48) não assumem valores reais nesse intervalo.

Quando o parâmetro entrópico assume valores no intervalo $[\frac{3}{2}, \frac{5}{3}]$, o valor de β é aquele que corresponde ao valor de α dado pela igualdade (3.60).

Figura 29: Lévy, lei tipo potência e suas diferenças: $q \in \left] \frac{3}{2}, \frac{5}{3} \right[$.

A figura 29(a) mostra os gráficos das diferenças entre as distribuições do tipo lei de potência e Lévy. Observa-se que enquanto o parâmetro entrópico se aproxima do limite $q \rightarrow \frac{3}{2}^+$, a diferença entre as distribuições aproxima-se da função nula. As diferenças sofrem acréscimos, quando o valor do parâmetro entrópico q se afasta da vizinhança de $q = \frac{3}{2}^+$.

Convém ressaltar que, no intervalo do parâmetro entrópico: $q \in \left] 1, \frac{3}{2} \right[$, as distribuições dos espaçamentos estão normalizadas. O espaçamento médio definido em (3.50) é unitário.

No intervalo $q \in \left] \frac{7}{5}, \frac{3}{2} \right[$, a distribuição de um elemento da matriz e a distribuição dos espaçamentos não apresentam um valor real para a variância. Nesse

intervalo, a distribuição de Lévy é a função aproximada da distribuição de um elemento da matriz do tipo lei de potência.

Segundo domínio: $q < 1$.

Obtém-se a distribuição de um elemento da matriz $H_{2 \times 2}$, integrando a distribuição das matrizes (tabela 2), com a sua respectiva função de partição válida nesse domínio.

$$P(h_{11}) = \frac{1}{Z\sqrt{2}} \int dh_{22}dh_{12} [1 - \alpha(1-q)(h_{11}^2 + h_{22}^2 + h_{12}^2)]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (3.79)$$

Para um valor totalmente arbitrário, a convergência da integral em (3.79) é garantida, se os valores dos elementos h_{11} , h_{22} e h_{12} se submeterem à condição

$$h_{11}^2 + h_{22}^2 + h_{12}^2 \leq \frac{1}{[\sqrt{\alpha(1-q)}]^2}. \quad (3.80)$$

A interpretação geométrica da desigualdade (3.80) é dada pelos pontos internos ou pelos que estão na superfície de uma esfera de raio $R_c = \frac{1}{\sqrt{\alpha(1-q)}}$. Esse raio de corte R_c , limita a variação dos elementos da matriz considerada. Efetuam-se as integrações necessárias em (3.79) e obtém-se a distribuição de um elemento da matriz.

$$P(h_{11}) = \sqrt{\frac{(1-q)\alpha}{\pi}} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + \frac{1}{1-q}\right)}{\Gamma\left(2 + \frac{1}{1-q}\right)} \right] [1 - \alpha(1-q)h_{11}^2]^{1+\frac{1}{1-q}}. \quad (3.81)$$

Nota-se na equação (3.81) que existe um elemento de corte $h_{11}^c = \frac{1}{\sqrt{\alpha(1-q)}}$. A figura a seguir mostra os gráficos das distribuições de um elemento da matriz, para alguns valores do parâmetro entrópico.

Figura 30: Distribuição de um elemento da matriz: $q < 1$.

A figura 30 mostra a convergências entre as distribuições de um elemento da matriz, nos dois limites extremos do intervalo de variação do parâmetro entrópico. No limite em que o parâmetro entrópico se aproxima da unidade, a distribuição de um elemento da matriz, que obedece uma lei do tipo potência, converge para a distribuição gaussiana (GOE). No limite em que o parâmetro entrópico assume valores infinitamente negativos, a distribuição de um elemento da matriz converge para a parábola

$$\lim_{q \rightarrow -\infty} P(h_{11}) = \frac{9\pi}{32\sqrt{2}} \left(1 - \frac{9\pi^2}{128} h_{11}^2 \right). \quad (3.82)$$

3.2.4 Simulações computacionais

É possível testar as distribuições dos espaçamentos e de um elemento da matriz, usando-se simulações numéricas. Geram-se de uma única vez, os elementos da matriz para um particular valor do parâmetro entrópico. Os valores de um elemento da matriz são separados e seu histograma ajustado pela distribuição teórica desenvolvida no ensemble. Diagonaliza-se cada matriz gerada aleatoriamente e obtém-se o respectivo espaçamento. O histograma dos espaçamentos é ajustado pela distribuição teórica dos espaçamentos.

Para gerar os números aleatórios que obedecem às distribuições definidas em (3.48) desenvolve-se um programa, cujo algoritmo se baseia na idéia do método da rejeição, mas que seja devidamente adaptado para esse ensemble. Esse método usado no presente trabalho é de importância fundamental, pois pode ser aplicado

para qualquer ensemble da Teoria das Matrizes Aleatórias e também pode ser estendido para matrizes de qualquer tamanho.

O primeiro teste é feito para a distribuição de um elemento da matriz e a sua respectiva distribuição dos espaçamentos, definidas por um parâmetro entrópico na vizinhança da unidade. Um exemplo é mostrado na figura a seguir.

Figura 31: Simulações numéricas e curvas teóricas de ajuste.

A figura 31(b) mostra o histograma de um elemento aleatório da matriz $H_{2 \times 2}$ e o gráfico da curva teórica prevista pelo ensemble generalizado. A figura 31(a) mostra o histograma do espaçamento e a respectiva curva teórica de ajuste. Geram-se simultaneamente três valores aleatórios de uma distribuição constante no intervalo $[0, 1]$. Esses valores são submetidos ao algoritmo desenvolvido e alguns valores selecionados, por obedecerem a distribuição da matriz aleatória (tabela 2). Com esses dados têm-se qualquer elemento da matriz e o espaçamento entre níveis vizinhos de energia. A figura 31 mostra que as distribuições teóricas dos espaçamentos e de um elemento da matriz estão em pleno acordo com as simulações numéricas para esse parâmetro entrópico. Usa-se o mesmo programa computacional para se obter quaisquer distribuições generalizadas, com parâmetros entrópicos no intervalo $[1, \frac{5}{3}]$. Simulam-se a distribuição de um elemento da matriz e a distribuição dos espaçamentos simultaneamente, para um valor particular do parâmetro entrópico contido no intervalo $]\frac{7}{5}, \frac{3}{2}[$.

Figura 32: Simulações numéricas e curvas teóricas de ajuste.

A figura 32(a) mostra a distribuição de um elemento da matriz, gerada numericamente e ajustada pela respectiva curva teórica. A figura 32(b) mostra a distribuição dos espaçamentos e a respectiva curva de ajuste. Nesse intervalo as distribuições não possuem variância, mesmo assim, o ajuste teórico está em pleno acordo com a simulação numérica. O valor de n é o número de matrizes geradas.

~ o ~ • ~ o ~

Capítulo 4

Ensemble Ortogonal Generalizado de Matrizes $N \times N$

As distribuições das matrizes aleatórias, as distribuições de um elemento das matrizes e as distribuições dos autovalores das matrizes são aquelas mais relevantes que serão investigadas nesse *ensemble*. As pesquisas concentram-se em obter as expressões analíticas dessas distribuições, explorando todas possibilidades de mudanças e generalizações possíveis. Investiga-se também, a maneira que as propriedades determinadas para a distribuição de um elemento da matriz se refletem nas distribuições espectrais. O limite termodinâmico da Mecânica Estatística usual é identificado com o limite, em que a ordem da matriz assume valores ilimitados ($N \rightarrow \infty$).

4.1 Distribuição das Matrizes Aleatórias $H_{N \times N}$

A distribuição das matrizes aleatórias $P_N(H)$ é calculada por meio da fórmula geral (3.8), em que :

$$P_N(H) = \frac{1}{Z_N} [1 - \alpha(1 - q) \text{tr} H_{N \times N}^2]^{-\frac{1}{1-q}}. \quad (4.1)$$

O parâmetro β satisfaz a igualdade (3.7). O traço do quadrado da matriz pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\text{tr} H_{N \times N}^2 = \sum_{i=1}^N h_{ii}^2 + 2 \sum_{1 \leq i < j}^N h_{ij}^2. \quad (4.2)$$

O parâmetro α pode ser fixado adotando-se uma escala conveniente. A função de partição generalizada Z_N pode ser obtida após o cálculo da integral em (3.9), no espaço das variáveis independentes, de dimensão $f = \frac{N(N+1)}{2}$. Escreve-se o elemento de volume usando as variáveis hipersférica [1]. As expressões analíticas

da função de partição são conseguidas fazendo dois estudos independentes, nos dois domínios de variação do parâmetro entrópico q . O método de obtenção das distribuições e seus respectivos intervalos de variação seguem em analogia ao que foi feito para as matrizes de tamanho 2×2 . As expressões analíticas para as funções de partição Z_N , nos respectivos domínios, estão contidas na tabela abaixo.

q	Z_N
$]-\infty, 1[$	$2^{-\frac{N(N-1)}{4}} \left[\frac{\pi}{\alpha(1-q)} \right]^{\frac{N(N+1)}{4}} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{1-q}+1\right]}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}+\frac{N(N+1)}{4}+1\right)}$
$\left] 1, 1 + \frac{4}{N(N+1)} \right[$	$2^{-\frac{N(N-1)}{4}} \left[\frac{\pi}{\alpha(q-1)} \right]^{\frac{N(N+1)}{4}} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{q-1}-\frac{N(N+1)}{4}\right]}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}$

Tabela 4: Funções de partição para as matrizes $N \times N$.

A primeira coluna da tabela mostra os dois intervalos de variação do parâmetro entrópico. Para o intervalo $q > 1$, existe um valor máximo para o parâmetro entrópico q , que diminui e conforme a ordem da matriz aumenta de acordo com a igualdade

$$q_{\text{máx}} = 1 + \frac{4}{N(N+1)} . \quad (4.3)$$

No primeiro intervalo, cujo parâmetro entrópico q varia no intervalo $]-\infty, 1[$, estabelece-se a condição de confinamento para o traço do quadrado da matriz.

$$\sum_{i=1}^N h_{ii}^2 + 2 \sum_{1 \leq i < j}^N h_{ij}^2 \leq \frac{1}{\beta(1-q)} . \quad (4.4)$$

A interpretação geométrica da desigualdade (4.4) são os pontos na superfície (ou internos) da hipersfera de raio $R = \frac{1}{\sqrt{\alpha(1-q)}}$. Para os valores de q menores que a unidade, o valor do traço do quadrado da matriz varia em um intervalo restrito [10, 17]. O motivo é assegurar a existência da normalização da distribuição das matrizes. A tabela a seguir contém as expressões analíticas das distribuições das matrizes aleatórias de tamanho $N \times N$. Contém também os valores médios do traço do quadrado da matriz.

q	$P_N(H)$	$\langle \text{tr} H^2 \rangle$
$]-\infty, 1[$	$\frac{1}{Z_N} [1 - \alpha(1-q) \text{tr} H_{N \times N}^2]^{\frac{1}{1-q}}$	$\frac{f}{2\alpha(1-q)(1-\lambda)}$
$\left] 1, 1 + \frac{4}{N(N+1)} \right[$	$\frac{1}{Z_N} [1 + \alpha(q-1) \text{tr} H_{N \times N}^2]^{-\frac{1}{q-1}}$	$\frac{f}{2\alpha(q-1)(\lambda-1)}$

Tabela 5: Distribuições das matrizes aleatórias de ordem $N \times N$.

Os valores médios dos traços são calculados substituindo as expressões analíticas das distribuições das matrizes, no segundo vínculo (3.3) adotado para esse *ensemble*.

4.2 Distribuição de um Elemento da Matriz $H_{N \times N}$

Tendo em vista os resultados contidos nas tabelas 4 e 5, avança-se nos estudos, com o objetivo de se obter as distribuições de um elemento da matriz $H_{N \times N}$. As várias integrações das distribuições das matrizes devem ser efetuadas no espaço dos elementos independentes da matriz, exceto para um elemento qualquer como mostra a igualdade

$$P(h_{11}) = \int dh^{f-1} P_N(H) . \quad (4.5)$$

O parâmetro f é o número total de elementos independentes da matriz $H_{N \times N}$. Essas integrações também são realizadas nos dois possíveis domínios de variação do parâmetro entrópico q .

4.2.1 Primeiro domínio: $1 < q < q_{máx}$

Nesse intervalo, calculam-se as integrais na igualdade (4.5), sem nenhum problema de divergência. A expressão analítica da distribuição de um elemento da matriz $H_{N \times N}$ tem seu decaimento obedecendo a uma lei do tipo potência, como pode ser observado na igualdade

$$P(h_{11}) = \frac{C_N}{[1 + (q-1)\alpha h_{11}^2]^{\lambda + \frac{1}{2}}} . \quad (4.6)$$

O valor da constante C_N emerge naturalmente dos próprios cálculos efetuados na igualdade (4.5). Nesse caso usa-se a distribuição das matrizes aleatórias, considerando os resultados das tabelas 4 e 5, estabelecendo o seguinte valor:

$$C_N = \sqrt{\frac{\alpha(q-1)}{\pi}} \frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2})}{\Gamma(\lambda)} . \quad (4.7)$$

Nessa altura do desenvolvimento teórico, faz-se necessário introduzir um novo parâmetro λ . Esse parâmetro relaciona o tamanho N da matriz e o parâmetro entrópico q :

$$\lambda = \frac{1}{q-1} - \frac{f}{2} . \quad (4.8)$$

A definição de λ em (4.8) tem uma simplicidade intrínseca e transfere esta simplicidade para as expressões analíticas das distribuições de um elemento da matriz.

Dessa forma a distribuição de um elemento da matriz (4.6) é reescrita de forma alternativa envolvendo apenas o parâmetro λ :

$$P(h_{11}) = \frac{C_N}{\left(1 + \frac{\beta}{\lambda} h_{11}^2\right)^{\lambda + \frac{1}{2}}} . \quad (4.9)$$

Observa-se que quando o parâmetro $\lambda \rightarrow \infty$, a distribuição (4.9) tende para distribuição gaussiana. A constante C_N também é reescrita envolvendo apenas o parâmetro λ :

$$C_N = \sqrt{\frac{\beta}{\lambda \pi}} \frac{\Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(\lambda)} . \quad (4.10)$$

As representações gráficas de $\lambda x q$ são exibidas na figura a seguir, para dois valores da ordem N da matriz aleatória.

Figura 33: Gráficos de $\lambda x q$ para dois valores de N .

Os gráficos da figura 33 sugerem o limite

$$\lim_{N \rightarrow \infty} q_{máx} = 1 . \quad (4.11)$$

Nesse limite, observa-se o comportamento gaussiano das distribuições de um elemento da matriz. Nesse limite, tem-se $\lambda \rightarrow \infty$. Porém, será realizado um estudo mais cuidadoso desse intervalo, pois suspeita-se que nele estão escamoteadas algumas propriedades relevantes desse *ensemble*.

Fazendo-se a transformada de Fourier¹ da distribuição de um elemento da matriz (4.6) e assumindo $\gamma = \alpha(q - 1) = \frac{\beta}{\lambda}$, tem-se

¹Vide igualdade (8.6) no apêndice.

$$F(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} C_N \int dh \frac{\cos kh}{[1 + \gamma h^2]^{\lambda + \frac{1}{2}}} . \quad (4.12)$$

Fazendo a conveniente mudança de variável

$$\sqrt{\gamma}h = u , \quad (4.13)$$

a integral (4.12) é identificada com a função de Bessel². A seguir usa-se a função de Bessel, em termos de uma diferença de funções, definidas por séries de potências³. Estuda-se o comportamento da transformada de Fourier, para os elementos da matriz próximos da origem. Obtêm-se duas transformadas de Fourier aproximadas $F(k)$, em dois respectivos domínios de λ . Continuando o estudo, efetuam-se as antitransformadas, das duas transformadas aproximadas de Fourier. São obtidas duas expressões analíticas para as distribuições de um elemento da matriz, nos respectivos intervalos de variação do parâmetro λ . Os resultados dos cálculos estão reunidos nas duas tabelas a seguir. A primeira tabela estabelece as correspondências entre o parâmetro entrópico q e o parâmetro λ .

λ	q
$]1, \infty[$	$1, 1 + \frac{4}{N(N+1)+4}$
$]0, 1[$	$1 + \frac{4}{N(N+1)+4}, 1 + \frac{4}{N(N+1)}$

Tabela 6: Correspondências entre os intervalos de variação de q e λ .

O parâmetro λ com valores inseridos na primeira coluna da tabela 6 é uma função de duas variáveis independentes: $\lambda = \lambda(q, N)$. O uso do parâmetro λ simplifica os trabalhos computacionais nos traçados dos gráficos, tanto das distribuições de um elemento da matriz, quanto as suas respectivas simulações numéricas. O motivo do desconforto de se trabalhar com o parâmetro entrópico q é o apertado intervalo de variação desse parâmetro. Por outro lado, por meio do parâmetro λ , fica estabelecida a existência de dois intervalos para a variação do parâmetro entrópico q , nos quais as distribuições de um elemento da matriz se comportam de formas distintas.

As transformadas de Fourier aproximadas e suas respectivas antitransformadas estão contidas na tabela.

λ	$F(k)$	$P_{\approx}(h_{11})$	constantes
$]1, \infty[$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\zeta k^2}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi\zeta}} e^{-\frac{1}{4\zeta} h_{11}^2}$	$\zeta = \frac{1}{(\lambda-1)4\gamma}$
$]0, 1[$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\delta k^{2\lambda}}$	$\frac{1}{\pi} \int dk \cos(kh_{11}) e^{-\delta k^{2\lambda}}$	$\delta = \frac{\Gamma(1-\lambda)}{\Gamma(1+\lambda)[4\gamma]^\lambda}$

²Vide igualdade (8.7) no apêndice.

³Vide igualdade (8.10) no apêndice.

Tabela 7: Distribuições aproximadas de um elemento da matriz $H_{N \times N}$.

A segunda coluna da tabela 7 contém as transformadas de Fourier aproximadas $F(k)$, das distribuições de um elemento de uma matriz $H_{N \times N}$. Na terceira coluna, estão as respectivas antitransformadas $P_{\approx}(h_{11})$. A função localizada na segunda linha e terceira coluna da tabela 7 é a distribuição gaussiana aproximada, da distribuição de um elemento da matriz, que tem decaimento do tipo lei de potência. Identifica-se a distribuição aproximada do elemento da matriz, na terceira linha e terceira coluna, com a distribuição de Lévy⁴.

A distribuição de um elemento da matriz e suas respectivas distribuições aproximadas, no intervalo $\lambda \in [1, \infty[$, podem ser visualizadas graficamente.

Figura 34: PL, Lévy e as suas diferenças.

A figura 34(a) mostra a diferença entre a distribuição de um elemento da matriz, que obedece uma lei do tipo potências e sua respectiva distribuição gaussiana aproximada. Os gráficos da figura 34(b) são as distribuições do elemento da matriz, que tem decaimento tipo lei de potência e sua respectiva gaussiana aproximada. Notam-se que para $\lambda = 5$ os dois gráficos praticamente coincidem.

O comportamento da diferença entre a $P_{PL}(h_{11})$ e sua gaussiana aproximada $P_G(h_{11})$, em função do tamanho N da matriz, pode ser conferido no gráfico a seguir.

⁴Vide igualdade (8.11) no apêndice.

Figura 35: Diferença entre PL e sua gaussiana aproximada para valores de N .

A figura 35 mostra que a diferença entre a distribuição de um elemento da matriz, do tipo lei de potência e sua respectiva gaussiana aproximada, tende a se anular em todos os pontos conforme o aumento da ordem N da matriz. Observa-se também que, próximo da origem, concentram-se um brusco aumento e diminuição dessa diferença. O comportamento da área definida pelo gráfico da diferença e o eixo horizontal do elemento da matriz podem ser estudados mediante os valores contidos na tabela.

N	Área
50	1.42×10^{-3}
100	1.03×10^{-3}
500	4.81×10^{-4}
1500	2.83×10^{-4}

Tabela 8: Áreas descritas pelos gráficos da diferença.

A tabela 8 mostra a variação da área, calculada no intervalo: $h_{11} \in [0, 3]$. As áreas diminuem enquanto o tamanho N da matriz aumenta. Tem-se o limite

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^3 P_{PL}(h_{11}, \lambda) dh_{11} = \int_0^3 P_G(h_{11}) dh_{11} . \quad (4.14)$$

No limite termodinâmico em que $N \rightarrow \infty$, a probabilidade de um elemento da matriz de ordem N coincide com sua respectiva probabilidade dada pela gaussiana aproximada, com excelente aproximação no intervalo em que $\lambda \in]1, \infty[$.

Essa convergência foi possível de ser observada, após a conveniente escolha da constante arbitrária

$$\beta = N^{\frac{1}{\psi}} . \quad (4.15)$$

Para provar a igualdade (4.15), usa-se a função $F(k) = e^{-\delta k^\psi}$ do integrando da distribuição de Lévy, já definida na tabela 7. É empregada a sua respectiva propriedade de independência $F(k, N) = [F(k)]^N$ e também leva-se em consideração a propriedade de dilatação na distribuição de Lévy

$$P(h_{11}) = \frac{1}{a_N} P\left(\frac{h_{11}}{a_N}\right) . \quad (4.16)$$

O valor de β em (4.15) é obtido de forma natural [16].

No intervalo $\lambda \in [0, 1]$, a distribuição aproximada de um elemento de uma matriz é uma distribuição de Lévy. As diferenças entre a distribuição PL e as respectivas distribuições de Lévy aproximada de um elemento da matriz ($H_{50 \times 50}$) são representadas graficamente.

Figura 36: PL, Lévy aproximada e as suas diferenças em função de h_{11} .

A diferença entre as distribuições gaussianas e a do tipo lei de potência podem ser observadas na figura 36(a), para alguns valores de λ . Nessa figura observa-se que quando o parâmetro λ se aproxima da unidade, as diferenças aumentam em todo intervalo de h_{11} . A figura 36(b) mostra os gráficos da distribuição de um elemento da matriz do tipo lei de potência e sua respectiva distribuição de Lévy aproximada, para um valor particular de λ . O próximo gráfico mostra o comportamento da diferença entre a distribuição do tipo lei de potência (PL) e

a sua respectiva distribuição de Lévy aproximada, em função do tamanho N da matriz.

Figura 37: Diferenças entre PL e Lévy aproximada em função de N .

Observa-se na figura 37 que a diferença entre a PL e sua respectiva Lévy aproximada, para valores afastados da origem, assume valores cada vez mais próximos de zero, enquanto N cresce ilimitadamente. No entanto, essa diferença vai se concentrando cada vez mais em torno da origem. A diferença nessa região é sempre não nula, para qualquer valor de λ variando nesse intervalo. Por outro lado, a área entre o eixo horizontal e o gráfico da diferença tende a se anular enquanto $N \rightarrow \infty$, como mostra a tabela abaixo.

N	Área
20	1.69×10^{-3}
100	2.16×10^{-4}
500	1.96×10^{-4}

Tabela 9: Áreas determinadas pelos gráficos das diferenças.

Do ponto de vista estatístico, é possível estabelecer a igualdade entre a distribuição de um elemento da matriz do tipo lei de potência e sua respectiva distribuição de Lévy aproximada, considerando que as áreas diminuem conforme o tamanho N da matriz vai aumentando. As áreas são calculadas em um intervalo, fixado arbitrariamente próximo da origem. Nesse caso tem-se a igualdade:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^{\frac{3}{2}} dh_{11} P_{PL}(h_{11}) = \int_0^{\frac{3}{2}} dh_{11} P_{Lévy}(h_{11}) . \quad (4.17)$$

Os gráficos das duas figuras anteriores foram desenhadas adotando-se para o valor de β , aquele já fixado anteriormente na igualdade (4.15).

4.2.2 Segundo domínio: $q < 1$

Nesse intervalo de variação do parâmetro entrópico q , aparecem as distribuições de um elemento da matriz $H_{N \times N}$, em que esse elemento da matriz pode variar dentro de um intervalo finito. Os elementos de corte são aqueles localizados nos extremos do intervalo de variação. Definindo $\alpha(1 - q) = \gamma$, o valor absoluto do elemento de corte tem uma simples expressão matemática dado por

$$h_{11}^c = \frac{1}{\sqrt{\gamma}}. \quad (4.18)$$

A distribuição de um elemento da matriz nesse domínio é obtida usando os mesmos cálculos aplicados para as matrizes aleatórias de ordem mínima (3.75). Corrige-se apenas o elemento diferencial do volume, para as coordenadas hiperesféricas, considerando-se a dimensão f dos elementos independentes da matriz $H_{N \times N}$. As expressões analíticas da função de partição generalizada e da respectiva distribuição de um elemento da matriz são apresentados na tabela.

Z_N^{-1}	$P(h_{11})$
$\sqrt{\frac{\gamma}{\pi}} \frac{\Gamma[1-\lambda]}{\Gamma[\frac{1}{2}-\lambda]}$	$Z_N^{-1} [1 - \gamma h_{11}^2]^{-\lambda - \frac{1}{2}}$

Tabela 8: Distribuição de um elemento da matriz $H_{N \times N}$.

O parâmetro auxiliar λ usado para representar a distribuição, na tabela 8, também já foi convenientemente definido em (4.8), mas sua variação agora se realiza no intervalo

$$\lambda \in \left] -\infty, -\frac{f}{2} \right[. \quad (4.19)$$

A representação gráfica do parâmetro λ em função do parâmetro entrópico q para dois valores de N .

Figura 38: Gráfico de λ vs q para dois valores de N .

Na figura 38, os gráficos são limitados superiormente pelo valor $\lambda_{\text{sup}} = -\frac{f}{2}$, obtido diretamente da igualdade (4.8) no limite $q \rightarrow -\infty$. Esse valor máximo superior de λ_{sup} aumenta negativamente com o quadrado de N , logo

$$\text{se } \lim_{N \rightarrow \infty} \lambda_{\text{sup}} = -\infty \implies \lim_{N \rightarrow \infty} \lambda(q) = -\infty. \quad (4.20)$$

O parâmetro λ diverge negativamente para qualquer valor do parâmetro q . O parâmetro γ pode ser escolhido respeitando o limite

$$\lim_{N \rightarrow 2} \gamma = \alpha(1 - q). \quad (4.21)$$

O valor da constante β já foi estabelecido anteriormente na igualdade (3.72). Tendo em vista o valor de $\beta(1 - q)$, define-se para o parâmetro γ a igualdade

$$\gamma = \frac{\pi}{2} \left[\frac{\Gamma(1 - \lambda)}{\Gamma(\frac{3}{2} - \lambda)} \right]^2. \quad (4.22)$$

Tomando o limite $q \rightarrow -\infty$ e $N = 2$ em (4.8) e substituindo valor de λ obtido, na igualdade (4.22), a distribuição de um elemento da matriz definida na tabela 8, coincide com a expressão analítica exibida em (3.82). Os gráficos das distribuições de um elemento da matriz, para alguns valores de N , são exibidas na figura

seguinte.

Figura 39: Distribuição de um elemento da matriz $H_{N \times N}$.

Observa-se na figura 39, uma certa convergência da distribuição de um elemento da matriz, quando os valores da ordem N da matriz crescem ilimitadamente. A função limite é a distribuição exponencial gaussiana

$$P(h_{11}) = \sqrt{\frac{|\lambda|\gamma}{\pi}} e^{\lambda\gamma h_{11}^2}. \quad (4.23)$$

A distribuição exponencial de um elemento da matriz em (4.23) foi obtida diretamente da distribuição exibida na tabela 8, após uma aproximação adequada. A representação gráfica da distribuição gaussiana está contida na figura.

Figura 40: Comparações entre as distribuições de um elemento da matriz.

A figura 40(a) mostra que as duas distribuições de um elemento da matriz já quase coincidem para $N = 5$. A figura 40(b) mostra os gráficos das diferenças entre a distribuição de um elemento da matriz do tipo lei de potência e a gaussiana aproximada (4.23). Nota-se que quanto maior a ordem N da matriz, menor a diferença entre elas, em todo intervalo de variação do elemento da matriz. A convergência para essa igualdade é muito rápida, de modo que as suas diferenças são cada vez mais desprezíveis, para as matrizes cuja dimensão assume valor cada vez maior.

4.3 Distribuição dos Autovalores da Matriz $H_{N \times N}$

A distribuição dos autovalores é obtida, tendo em vista a igualdade (2.30), mas representada de forma mais geral:

$$P(E_1, \dots, E_N) = P(\text{tr} H_{N \times N}^2) \prod_{j>i} |E_j - E_i| \quad . \quad (4.24)$$

Levando em consideração a invariância do traço do quadrado da matriz, a igualdade (4.24) é reescrita em função dos autovalores da matriz:

$$P(E_1, \dots, E_N) = P\left(\sum_{i=1}^N E_i^2\right) \prod_{j>i} |E_j - E_i| \quad . \quad (4.25)$$

Sabendo-se que existem duas possibilidades para a distribuição das matrizes aleatórias, nesse *ensemble* generalizado, as duas respectivas densidades de estados são calculadas, nos dois intervalos de variação do parâmetro entrópico q .

4.3.1 Primeiro domínio: $1 < q < 1 + \frac{4}{N(N+1)}$

Usando a representação integral da função Gama (8.3) e o conveniente argumento tem-se

$$\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right) = \int_0^\infty dt e^{-t} t^{\frac{1}{q-1}-1} \quad . \quad (4.26)$$

Fazendo-se a seguinte mudança de variável na integral anterior:

$$t = \left(1 + \frac{\beta}{\lambda} \text{tr} H^2\right) \xi \quad , \quad (4.27)$$

identifica-se $\frac{\beta}{\lambda} = \alpha(q-1)$. Considerando a invariância rotacional do traço do quadrado da matriz, determina-se a distribuição dos autovalores dada por

$$P(E_1, \dots, E_N; \beta, \lambda) = \frac{Z_N^{-1}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi \xi^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-\xi} e^{-\frac{\beta\xi}{\lambda} \sum_{i=1}^N E_i^2} \prod_{j>i} |E_j - E_i| \quad . \quad (4.28)$$

Introduzindo constantes convenientes na igualdade (4.28), usando o valor da função de partição generalizada Z_N , contido na tabela 4 e mais uma quantidade de álgebra, prova-se

$$P(E_1, \dots, E_N; \beta, \lambda) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_0^\infty d\xi \xi^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-\xi} P_{GOE}\left(E_1, \dots, E_N; \frac{\beta\xi}{\lambda}\right) \quad . \quad (4.29)$$

A distribuição dos autovalores, nesse *ensemble*, é uma espécie de “transformada de Laplace” da distribuição dos autovalores (2.30), prevista pelo GOE. Fazendo a mudança de variável

$$x_k = \sqrt{\frac{2\beta\xi}{\lambda}} E_k \quad , \quad (4.30)$$

tem-se o valor $\alpha = \frac{1}{2}$ fixado. Tal valor é geralmente usado nos livros textos [8, 10]. Reescrevendo a igualdade (4.29), em termos das novas variáveis x_k , resulta:

$$P(E_1, \dots, E_N; \beta, \lambda) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \left(\frac{2\beta}{\lambda}\right)^{\frac{N}{2}} \int_0^\infty d\xi \xi^{\lambda+\frac{N}{2}-1} e^{-\xi} P_{GOE}\left(x_1, \dots, x_N, \frac{1}{2}\right) \quad . \quad (4.31)$$

Chama-se a atenção para o fato das variáveis x_k serem aquelas em que o espectro se encontra desdobrado.

Usando novamente a invariância do traço, determina-se também a distribuição das matrizes aleatórias do GOE-q, sob o aspecto de uma transformada:

$$P(H; \beta, \lambda) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_0^\infty d\xi \xi^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-\xi} P_{GOE}\left(H, \frac{\beta\xi}{\lambda}\right) \quad . \quad (4.32)$$

Sabe-se que densidade de estados, dada pelo GOE, é o semicírculo (2.31), estabelecido para grandes valores de N . Tendo em vista a igualdade (4.29), a densidade de estados nesse *ensemble* é generalizada naturalmente para

$$\rho(E; \beta, \lambda) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \sqrt{\frac{2\beta}{\lambda}} \int_0^{\frac{\lambda N}{\beta E^2}} d\xi e^{-\xi} \xi^{\lambda-\frac{1}{2}} \frac{1}{\pi} \sqrt{2N - \frac{2\beta E^2}{\lambda} \xi} \quad . \quad (4.33)$$

A densidade de estados é caracterizada por uma representação analítica dada por uma integral, como mostra a igualdade (4.33). As representações gráficas para alguns valores de λ , com $\beta = N^{\frac{1}{2\lambda}}$, estão desenhadas na figura.

Figura 41: Densidades de estados do $GOE-q$.

A figura 41 mostra as densidades de estados generalizadas, para alguns valores de λ . A figura 41(a) mostra uma tendência de confinamento dos autovalores, quando λ assume valores no intervalo $]1, \infty[$. Para valores ilimitados de λ , a distribuição dos autovalores (4.33) aproxima-se de uma distribuição semicircular. A figura 41(b) mostra que os autovalores não estão confinados, enquanto λ variar no intervalo $]0, 1[$. O decaimento assintótico de cada uma das distribuições é do tipo lei de potência. Isso pode ser verificado, fazendo-se uma conveniente mudança de variável na integral da igualdade (4.33):

$$t = \frac{\beta E^2}{N\lambda} \xi. \quad (4.34)$$

O comportamento do tipo lei de potência fica explicitado na igualdade:

$$\rho(E; \beta, \lambda) = \frac{N}{|E|^{2\lambda+1}} \left(\frac{N\lambda}{\beta} \right)^\lambda \left[\frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2}) M\left(\lambda + \frac{1}{2}, \lambda + 2; -\frac{N\lambda}{\beta E^2} t\right)}{\sqrt{\pi} \Gamma(\lambda) \Gamma(\lambda + 2)} \right]. \quad (4.35)$$

Para se chegar a essa expressão, usou-se a igualdade (8.12) dada no apêndice. Observa-se na igualdade (4.35) que, se o nível E assumir valores cada vez maior, a função hipergeométrica converge para uma particular expressão analítica dada por $M\left(\lambda + \frac{1}{2}, \lambda + 2, 0\right)$. Isso implica que o comportamento da densidade de estados generalizados seja descrito por uma lei de potência.

Nota-se na figura 41(a) ($\lambda > 1$) a semelhança entre as distribuições dos autovalores dados pela igualdade (4.33) com a distribuição semicircular dos autovalores. Porém, existem diferenças cruciais entre o semicírculo e a densidade de

estados generalizado (4.33). Para verificar essas diferenças, tenta-se determinar um semicírculo por meio dos conceitos inseridos no Método de Campo Médio. A densidade de energia (4.25) pode ser reescrita explicitamente na forma

$$P(E_1, \dots, E_N; \beta, \lambda) = K_N \left[1 + \frac{\beta}{\lambda} \sum_{i=1}^N E_i^2 \right]^{-\frac{1}{q-1}} \prod_{1 \leq i < j}^N |E_j - E_i| . \quad (4.36)$$

Escrevendo o segundo membro na igualdade (4.36) na forma $P(E) = Ce^{-W}$, na qual a função W é definida pela equação

$$W(E_1, \dots, E_N; \beta, \lambda) = \frac{\ln \left[1 + \frac{\beta}{\lambda} \sum_{i=1}^N E_i^2 \right]}{q-1} - \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \ln |E_j - E_i| . \quad (4.37)$$

Com a finalidade de buscar na função W , definida na igualdade anterior (4.37), um valor extremo, estabelece-se a condição $\delta W = 0$. Essa variação é realizada considerando um vínculo adicional, que é a normalização da densidade de estados

$$\int dE \rho(E) = N . \quad (4.38)$$

O resultado do cálculo variacional é uma equação integral do tipo

$$QE = \int dE_1 \frac{\rho(E_1)}{|E - E_1|} . \quad (4.39)$$

A função solução $\rho(E)$, ou seja, o valor principal da equação integral anterior é, o semicírculo de Wigner:

$$\rho(E) = \begin{cases} \frac{Q}{\pi} \sqrt{\frac{2N}{Q} - E^2} & -\sqrt{\frac{2N}{Q}} \leq E \leq \sqrt{\frac{2N}{Q}} \\ 0 & E < -\sqrt{\frac{2N}{Q}} \text{ ou } E > \sqrt{\frac{2N}{Q}} \end{cases} . \quad (4.40)$$

O valor de Q na igualdade (4.40) foi definido, no decorrer dos cálculos até chegar na igualdade (4.39), e tem seu valor calculado por intermédio da igualdade

$$Q = \frac{2\alpha}{1 + \alpha(q-1) \langle tr H^2 \rangle} . \quad (4.41)$$

Usando o valor médio de $\langle tr H^2 \rangle$ dado na tabela 5, obtém-se o valor de Q :

$$Q = \frac{f}{2\alpha(q-1)(\lambda-1)} . \quad (4.42)$$

A figura a seguir mostra a convergência entre as densidades de estados para as matrizes de ordem $N = 10$.

Figura 42: Densidade de estados e o respectivo semicírculo aproximado.

A figura 40 mostra a convergência da distribuição dos autovalores dada pela igualdade (4.33), para a distribuição semicircular dada na igualdade (4.40). Essa convergência manifesta-se quando λ assume valores ilimitados. Para verificar uma possível convergência entre o semicírculo (4.40) e a densidade generalizada de estados (4.33), desenham-se os seus respectivos gráficos, para um valor particular de λ e dois valores distintos de N .

Figura 43: Densidades de estados com $\lambda = 2$, fixo.

A figura 41 mostra claramente uma semelhança entre os gráficos da figura 41(a) e os gráficos da figura 41(b), apresentadas nas figuras apenas com escalas

diferentes. O método de campo médio não se aplica a esse intervalo do parâmetro entrópico q , a não ser no limite $\lambda \rightarrow \infty$, no qual as densidades generalizadas de estados do tipo lei de potência convergem para as respectivas densidades de estados semicirculares, como mostra a figura 40.

4.3.2 Segundo domínio: $q < 1$

Nesse domínio, a distribuição de um elemento da matriz $H_{N \times N}$ converge para uma gaussiana (4.23). Esse fato implica que todas as estatísticas se comportem como aquelas descritas no *Ensemble* Ortogonal Gaussiano. Espera-se que a densidade de estados seja um semicírculo. As densidades generalizadas de estados, nesse domínio do parâmetro entrópico q , são obtidas usando as distribuições das matrizes aleatórias contidas na tabela 4 e a invariância do traço do quadrado da matriz. Essas distribuições generalizadas são representadas matematicamente por

$$P(E_1, \dots, E_N, \alpha, q) = C_N \left[1 - (1 - q)\alpha \sum_{i=1}^N E_i^2 \right]^{\frac{1}{1-q}} \prod_{1 \leq i < j}^N |E_j - E_k| . \quad (4.43)$$

A densidade de estados para o *ensemble* de traço restrito ou limitado, é o conhecido semicírculo [17]. Para obter explicitamente a densidade de estados semicirculares, usa-se novamente o Método de Campo Médio. Nesse caso, obtém-se a mesma densidade de estados semicirculares, dada pela igualdade (4.40). O valor do parâmetro Q é modificado para

$$Q = \frac{2\alpha}{1 - \alpha(1 - q) \langle \text{tr} H^2 \rangle} . \quad (4.44)$$

Substituindo o valor do traço do quadrado da matriz contido na tabela 5, na igualdade (4.44), resulta:

$$Q = \frac{f}{2\alpha(1 - q)(1 - \lambda)} . \quad (4.45)$$

O valor do parâmetro α é aquele já fixado anteriormente pela igualdade (4.22).

Para conferência dos cálculos efetuados, realiza-se uma simulação numérica, utilizando o Método Metrópolis⁵. Primeiramente, os autovalores são gerados diretamente a partir da igualdade (4.43). Os autovalores são organizados em um histograma. Ajustam-se os dados simulados, utilizando-se a densidade de estados semicirculares (4.40).

⁵Vide os detalhes desse algoritmo no apêndice.

Figura 44: Simulação numérica e a densidade de estados semicirculares.

A figura 44 mostra o histograma de um autovalor escolhido e o perfeito ajuste realizado pela densidade de estados semicirculares, obtida utilizando-se o Método de Campo Médio.

4.4 Simulações Numéricas

Para conferir se estão realmente corretas as previsões teóricas da distribuição de um elemento da matriz e a sua respectiva densidade de estados, após geradas e diagonalizadas as matrizes aleatórias, são necessárias realizar algumas simulações computacionais. Para isso foi desenvolvido um algoritmo⁶ eficiente para gerar as matrizes aleatórias. O intervalo de variação do parâmetro λ nesta seção é aquele em que este assume valores positivos. As duas figuras a seguir mostram principalmente as simulações das matrizes por intermédio da distribuição de um dos elementos destas e a densidade de estados após as respectivas diagonalizações de cada uma das matrizes geradas.

⁶O algoritmo ACB|MPP é apresentado em detalhes no apêndice.

Figura 45: Simulações numéricas e as curvas teóricas de ajuste: $\lambda \in [0, 1]$.

A figura mostra a simulação numérica e o respectivo ajuste teórico, da distribuição de um elemento da matriz e da densidade de níveis. Cada matrizes é gerada a partir dos seus elementos e a seguir é diagonalizada. Nota-se nesta figura a exatidão das previsões teóricas desse *ensemble*, devida a eficiência do algoritmo, especialmente (e ineditamente) desenvolvido para esse *ensemble*. A figura a seguir mostra a performa-se da simulação em outro intervalo de variação do parâmetro λ .

Figura 46: Simulações numéricas e as curvas teóricas de ajuste: $\lambda \in [1, \infty[$.

Ressalta-se que, a partir da eficiência do programa computacional, emerge uma situação muito cômoda para, futuramente estudar numericamente quaisquer tipo de estatísticas desse *ensemble*, sejam elas de curto ou de longo alcance.

4.5 Desdobramento do Espectro

Com a capacidade computacional de obter numericamente os níveis de energia, que satisfazem a densidade de estados prevista nesta tese, determina-se então uma outra expressão matemática teórica que rege uma peculiar transformação entre os níveis E_i e as novas variáveis desdobradas x_i , a partir da igualdade⁷ escrita a seguir:

$$x_i = \int_0^{E_i} dE \rho(E) . \quad (4.46)$$

Substituindo a expressão analítica da densidade de níveis (4.33) de o GOE-q, na integral existente no segundo membro da igualdade (4.46), e efetuando algumas simplificações algébricas, resulta:

$$x_i = \frac{N}{\pi \Gamma(\lambda)} \left[\frac{\pi}{2} \int_{\frac{N\lambda}{\alpha E_i^2}}^{E_i} d\xi e^{-\xi} \xi^{\lambda-1} + \int_0^{\frac{N\lambda}{\alpha E_i^2}} d\xi e^{-\xi} \xi^{\lambda-1} \left(\phi + \frac{\text{sen}(2\phi)}{2} \right) \right] , \quad (4.47)$$

em que o valor do ângulo ϕ é definido por

$$\phi = \arcsen\left(E \sqrt{\frac{\alpha \xi}{\lambda N}}\right) . \quad (4.48)$$

As duas igualdades anteriores realizam inteiramente o desdobramento do espectro de energia desse *ensemble*. Usando os níveis obtidos pelas simulações computacionais, é possível verificar as igualdades (4.47) e (4.48), sabendo-se que a densidade de variáveis desdobradas é uma função constante e que estas variáveis x_i variam no intervalo $[-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}]$. A figura a seguir exibi alguns resultados dessas simulações e dos cálculos numéricos efetuados.

⁷Usada no GOE.

Figura 45: Densidade de variáveis desdobradas.

Observa-se na figura 47 que distribuição das variáveis simulada se aproxima da função constante (curva vermelha), à medida em que os números de matrizes aleatórias vão aumentando no *ensemble*. Portanto, um excelente desdobramento do espectro, requer um número muito grande de matrizes. Para poucas matrizes existem grandes flutuações em torno da função constante, como podem ser verificadas na figura 47. Isso leva a crer que o *Ensemble Ortogonal Generalizado* não é ergódico no intervalo $\lambda \in [0, 1]$; no sentido que as estatísticas realizadas para uma única matriz, mesmo que esta contenha muitos elementos é diferente das estatísticas realizadas em todo *ensemble*.

4.6 Distribuição dos espaçamentos

O estudo da distribuição dos espaçamentos entre níveis vizinhos, realiza-se em a TMA por meio da função *gap* $E(0, s)$ que é a probabilidade de não encontrar nenhum autovalor no intervalo de comprimento s . Essa função *gap* é obtida integrando duas vezes a igualdade

$$p(0, s) = \frac{d^2 E}{ds^2}(0, s) \quad . \quad (4.49)$$

A distribuição dos espaçamentos $p(0, s)$, utilizada nos cálculos é a ‘*surmmize*’ de Wigner (2.26). A expressão analítica da função *gap* é dada por

$$E_{GOE}(0, y) \simeq 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{y\sqrt{\pi}}{2}\right) \quad . \quad (4.50)$$

Nesse caso, define-se naturalmente a função *gap* no GOE-q, por meio da transformada

$$E(0, s) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\lambda-1} E_{GOE}(0, y) \quad . \quad (4.51)$$

A variável s está desdobrada no GOE-q por meio da integral

$$s = \int_{-\theta}^{\theta} dE \rho(E) \quad , \quad (4.52)$$

em que a densidade de estado $\rho(E)$ é dada pela igualdade (4.33). A variável y é uma variável desdobrada no GOE por meio da integral

$$y = \int_{-\sqrt{2\gamma\xi}\theta}^{\sqrt{2\gamma\xi}\theta} dE \rho_{GOE}(E) \quad , \quad (4.53)$$

em que a densidade de estado é o semicírculo. A função *gap* é a probabilidade de não encontrar qualquer autovalor dentro do intervalo $(\theta, -\theta)$. Para construir o gráfico da função *gap*, inicia-se θ com um valor arbitrário e por meio da igualdade (4.52) determina-se o respectivo valor de s . Substituindo o mesmo valor de θ na igualdade (4.53), determina-se y cujo valor é utilizado na igualdade (4.51), determinando o valor correspondente de $E(0, s)$.

Usando-se o espectro desdobrado desenvolvido na seção anterior, elabora-se o histograma dos espaçamentos que é exibido na figura a seguir.

Figura 48: Distribuição espaçamentos para matriz de ordem $N = 20$.

A figura anterior mostra o histograma dos espaçamentos e um ajuste teórico realizado com a distribuição dos espaçamentos (3.48), obtido no *ensemble* de matrizes aleatórias de ordem dois.

4.7 Distribuição da componente do autovetor

O processo de diagonalização permite calcular numericamente as componentes dos autovetores. Nesse caso é possível obter (numericamente) a distribuição de uma componente de um autovetor e depois comparar com a distribuição de Porter-Thomas, prevista pelo GOE na igualdade (2.42). Os resultados podem ser entendidos tendo em vista a seguinte figura.

Figura 49: Distribuição de uma componente de um autovetor.

A figura mostra o ajuste teórico das simulações para dois valores do parâmetro λ e dois valores para os números de matrizes aleatórias tomadas no *ensemble*. A função de ajuste é a distribuição de Porter-Thomas (2.42) prevista no GOE. A igualdade das distribuições de uma componente de um autovetor calculadas no dois *ensembles* implica na manutenção da invariância rotacional dos autovetores nos dois *ensembles*.

~ o ~ • ~ o ~

Capítulo 5

Correlações

Nesse capítulo serão estudados as interdependências entre dois elementos da matriz, e entre dois autovalores da matriz diagonalizada. As distribuições de dois elementos da matriz e as distribuições de dois autovalores da matriz serão apresentadas explicitamente.

5.1 Correlações entre dois elementos da matriz

Os estudos das interdependências entre dois elementos quaisquer de uma matriz aleatória, de tamanho arbitrário, podem ser realizados de duas maneiras. A primeira é por intermédio da função diferença, definida por

$$D_{\lambda}(h_{11}, h_{22}) = P(h_{11})P(h_{22}) - P(h_{11}, h_{22}) \quad . \quad (5.1)$$

A função de duas variáveis independentes $P(h_{11}, h_{22})$ é a distribuição de dois elementos independentes quaisquer da matriz. Para visualizar graficamente a função diferença (5.1), fixa-se um dos elementos pelo valor nulo e mantém-se o outro elemento arbitrário:

$$D_{\lambda}(0, h) = P(0)P(h) - P(0, h) \quad . \quad (5.2)$$

Dada a expressão analítica da função diferença (5.2), uma representação gráfica é possível e necessária, para um estudo do seu comportamento, para cada valor do parâmetro λ .

Outra maneira de investigação da interdependência entre dois elementos é por intermédio dos momentos. Nesse caso define-se o coeficiente de correlação por

$$C_q = 1 - \frac{\langle h_{11}^2 h_{22}^2 \rangle_q}{\langle h_{11}^2 \rangle \langle h_{22}^2 \rangle} \quad . \quad (5.3)$$

Esse coeficiente de correlação depende do valor parâmetro entrópico q . Os valores médios são obtidos por meio da igualdade

$$\langle h^2 \rangle_q = \frac{\int dh h^2 P^q(h)}{\int dh P^q(h)} \quad . \quad (5.4)$$

A função $P(h)$ é a distribuição de um elemento da matriz estabelecida na igualdade (4.6), ou aquela contida na tabela 8.

O valor médio de dois elementos é calculado simultaneamente pela igualdade

$$\langle h^2 h^2 \rangle_q = \frac{\int dh dh h^2 h^2 P^q(h, h)}{\int dg dh P^q(h, h)} . \quad (5.5)$$

A função de duas variáveis $P(h, h)$ é a distribuição de dois elementos da matriz, cujas expressões analíticas serão obtidas e apresentadas, para se efetuar todos os cálculos pertinentes.

A função diferença e o coeficiente de correlação serão estudados nos dois intervalos de variação do parâmetro entrópico q .

5.1.1 Primeiro domínio: $1 < q < q_{máx}$

A primeira providência é determinar a distribuição de dois elementos da matriz, por exemplo $P(h_{11}, h_{22})$. Essa distribuição é obtida integrando a distribuição de todos elementos da matriz, contida na tabela 4, exceto dois elementos quaisquer, ou seja,

$$P(h_{11}, h_{22}) = \int d^{f-2} h P(H) . \quad (5.6)$$

Efetuando-se as integrações¹ devidas, tem-se

$$P(h_{11}, h_{22}) = \lambda \frac{\alpha(q-1)}{\pi} [1 + \alpha(q-1)(h_{11}^2 + h_{22}^2)]^{-\lambda-1} . \quad (5.7)$$

Novamente usa-se: $\alpha(q-1) = N^{\frac{1}{2\lambda}}$.

A função diferença para um dos elementos fixado pelo valor nulo é dado por

$$D_\lambda(0, h) = \frac{\alpha(q-1)}{\pi} \left\{ \frac{\left[\frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda)} \right]^2}{[1 + \alpha(q-1)h^2]^{\lambda+\frac{1}{2}}} - \frac{\lambda}{[1 + \alpha(q-1)h^2]^{\lambda+1}} \right\} . \quad (5.8)$$

A representação gráfica da igualdade (5.8) é apresentada na figura a seguir.

¹Vide equação (8.14) no apêndice

Figura 50: Função diferença para $q \in [1, q_{máx}]$.

A figura 50(a) são os gráficos da função diferença para um valor fixo de λ ($\lambda = 2$), e para alguns valores do tamanho da matriz. Pode-se dizer que o aumento do tamanho da matriz acentua o comportamento de curto alcance, ou seja, as distribuições dos dois elementos da matriz perdem a independência para os pequenos valores do elemento da matriz. A função diferença concentra seus valores cada vez mais próximos da origem, quanto mais o tamanho N da matriz aumenta. Porém, as distribuições dos dois elementos da matriz exibem cada vez mais uma forte dependência (valores no eixo vertical) perto da origem, enquanto o tamanho da matriz aumenta. A figura 50(b) mostra a sensibilidade da função diferença em relação ao parâmetro λ , mantendo-se fixo o tamanho da matriz. Nota-se que à medida que os valores de λ vão aumentando, registra-se uma mudança de comportamento, de curto alcance para outro de longo alcance, ou seja, as fortes dependências entre as distribuições dos dois elementos da matriz, próximo da origem, diminuem. Porém, essas dependências aumentam para os valores mais afastados da origem, conforme λ aumenta. As distribuições dos dois elementos ficam totalmente independentes, para todos valores de h no limite

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} D_\lambda(0, h) = 0 \quad . \quad (5.9)$$

O coeficiente de correlação é calculado usando a igualdade (5.3). Após uma quantidade considerável de álgebra, chega-se, felizmente, a um resultado simples:

$$C_{q>1} = \frac{1}{1 - \lambda} \quad . \quad (5.10)$$

Convém observar que não se obtém esse valor (5.10), para o coeficiente de correlação entre dois elementos da matriz, caso sejam alteradas as definições (5.4,

5.5) usadas para os cálculos dos valores médios. Observa-se que o coeficiente de correlação entre dois elementos da matriz, não depende do tamanho N da matriz, explicitamente. A representação gráfica do coeficiente de correlação em função do parâmetro λ é apresentada na figura a seguir.

Figura 51: Coeficiente de correlação para $\lambda > 0$.

A figura 51 mostra que o coeficiente de correlação entre dois elementos da matriz tende para o valor nulo enquanto o parâmetro λ assume valores ilimitados:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} C_q(\lambda) = 0 \quad . \quad (5.11)$$

Nesse caso, os dois elementos da matriz são totalmente descorrelacionados. Isso significa que o valor da variância de um dos elementos da matriz não depende do valor da variância do outro elemento de correspondência. Para outros valores do parâmetro λ , os valores das variâncias dos dois elementos da matriz são correlacionados. Nota-se que, para o valor unitário do parâmetro λ , os valores das variâncias dos dois elementos da matriz são infinitamente correlacionados.

5.1.2 Segundo domínio: $q < 1$

Nesse intervalo de variação do parâmetro entrópico q , o parâmetro λ varia no intervalo $\lambda \in]-\infty, 0]$. A distribuição simultânea de dois elementos da matriz é obtida usando a igualdade (5.6), a expressão analítica da distribuição das matrizes contida na tabela 5 e mais uma quantidade de álgebra conhecida e utilizada anteriormente:

$$P(h_{11}, h_{22}) = (-\lambda) \frac{\alpha(1-q)}{\pi} [1 + \alpha(1-q)(h_{11}^2 + h_{22}^2)]^{-\lambda-1} \quad . \quad (5.12)$$

Substituindo as expressões analíticas das distribuições de um elemento da matriz (tabela 8) e o valor igualdade (5.12), na definição (5.2), a função diferença é dada matematicamente por

$$D_\lambda(0, h) = \frac{\gamma}{\pi} \left\{ \left[\frac{\Gamma(1-\lambda)}{\Gamma(\frac{1}{2}-\lambda)} \right]^2 [1-\gamma h^2]^{-\lambda-\frac{1}{2}} + \lambda [1-\gamma h^2]^{-\lambda-1} \right\} . \quad (5.13)$$

O valor do parâmetro γ é o mesmo que aquele fixado anteriormente na igualdade (4.22). Os gráficos da função diferença, em que $q \rightarrow -\infty$, estão desenhados na figura a seguir, para três valores do tamanho N da matriz.

Figura 52: Função diferença para $\lambda = -\frac{f}{2}$.

Observa-se na figura 52 que a função diferença tende a se anular para todos os valores do elemento h , enquanto o tamanho da matriz aumenta cada vez mais:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} D_\lambda(0, h) = 0 . \quad (5.14)$$

A figura 52 indica que existe um ponto de nó, em que todas funções exibidas são concorrentes. O valor da função diferença para esse particular valor de h é zero, qualquer que seja o valor do tamanho da matriz.

Para qualquer valor finito para o tamanho N da matriz, a interdependência entre os elementos é de curto alcance:

$$\lim_{h \rightarrow \infty} D_\lambda(0, h) = 0 . \quad (5.15)$$

A função diferença apresenta valores muito pequenos, indicando que nesse caso as estatísticas possuem características semelhantes às encontradas no *Ensemble* Ortogonal Gaussiano.

O coeficiente de correlação C_q , calculado para esse domínio do parâmetro entrópico q , por meio da igualdade (5.3), resulta o valor

$$C_{q<1}(\lambda) = \frac{1}{1-\lambda} . \quad (5.16)$$

O coeficiente de correlação tende a se anular no limite termodinâmico:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} C_{q<1}(\lambda) = 0 . \quad (5.17)$$

O valor do segundo momento da distribuição de um dos elementos da matriz é descorrelacionado do valor do segundo momento de outra distribuição de um elemento da matriz.

5.2 Correlações entre dois autovalores da matriz

Para realizar um estudo sobre as interdependências entre dois autovalores da matriz, admite-se os mesmos mecanismos utilizados nos *ensembles* gaussianos. A função de correlação entre dois autovalores $R(E_1, E_2; \lambda,)$ e a densidade de estados são usadas para calcular a função *cluster*, definida por

$$Y_2(E_1, E_2; \beta, \lambda) = 1 - \frac{R(E_1, E_2; \beta, \lambda)}{\rho(E_1; \beta, \lambda) \rho(E_2; \beta, \lambda)} . \quad (5.18)$$

O caso mais importante é quando o parâmetro entrópico q assume valores maiores que a unidade. Sabe-se que, para valores menores que a unidade desse parâmetro, as estatísticas são semelhantes às daquelas de o GOE.

A função de correlação, em que $\lambda > 0$, pode ser calculada por meio da transformada

$$R(E_1, E_2) = \frac{2\beta}{\Gamma(\lambda + 1)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^\lambda R_{GOE}\left(x_1, x_2; \frac{1}{2}\right) . \quad (5.19)$$

A função correlação $R_{GOE}(x_1, x_2; \frac{1}{2})$ é aquela já prevista pelo GOE [10]. Nota-se a semelhança entre a igualdade (5.19) e a igualdade (4.32), ambas são determinadas por meio de uma transformada de uma respectiva função distribuição do GOE. Afirma-se que qualquer fenômeno que não seja descrito pelo GOE será enquadrado dentro do GOE-q, por meio de uma transformada das distribuições previstas no GOE. Essa função correlação será usada nos futuros trabalhos de pesquisas, momento em que os estudos concentrar-se-ão nas estatísticas de longo alcance.

~ o ~ • ~ o ~

Capítulo 6

Aplicações

Nesse capítulo, apresentam-se duas possíveis aplicações dos resultados desse *ensemble*. Uma das aplicações, emerge da correspondência entre o GOE-q e os sistemas eletrônicos desordenados. Essa aplicação será melhor detalhada a seguir. Outra aplicação se refere aos fenômenos de conexões entre sítios (*networks*), conhecidos nas literaturas por *scale-free*. Essa aplicação será comentada rapidamente, mas serão citadas as devidas referências.

6.1 Sistemas Eletrônicos Desordenados

No sistema eletrônico desordenado, ocorre um fenômeno físico, no qual os níveis de energia são quantizados. A distribuição dos espaçamentos que melhor ajusta os dados simulados não é a distribuição de Wigner (2.27), nem a distribuição de Poisson (2.2). Esse tipo de sistema pode apresentar uma transição de Anderson, de um estado estendido (Wigner) para outro estado localizado (Poisson). Esse fenômeno pode ocorrer, por exemplo, em uma rede cristalina, na qual as impurezas são distribuídas de forma não regular. Os estados quantizados são obtidos pela teoria e usados para obter os espaçamentos entre o níveis vizinhos. Um ajuste teórico pode ser conseguido por meio da expressão analítica [24, 22]

$$P(s) = Bs^\gamma \exp(-As^\alpha) \quad . \quad (6.1)$$

O parâmetro B é fixado pela normalização. O parâmetro A é fixado adotando-se o valor unitário para o espaçamento médio. O parâmetro α é obtido pelo melhor ajuste dos dados simulados ou experimentais. Essa expressão matemática é conseguida usando o formalismo de a Teoria das Matrizes Aleatórias, mas geralmente os *ensembles* gerados não preservam a invariância rotacional da distribuição das matrizes aleatórias. Ou então, para conseguir uma transição entre algum par de classes de universalidades, adota-se um vínculo adicional e mantém-se a entropia de BGS. Lembrando-se que o GOE-q não destrói a invariância rotacional, tenta-se um ajuste para os dados simulados, usando os resultados dados pelo GOE-q.

Acredita-se que nesse caso, esse ajuste seria algo novo nessa área de pesquisa.

Em um recente trabalho publicado sobre o assunto [25], a distribuição (6.1) dos espaçamentos ($\gamma = 1$) foi usada para conseguir um excelente ajuste. Nesse caso, o desvio padrão tenha o valor $\sigma_0 = 0.595$. Esses dados numéricos¹ foram ajustados também pela distribuição generalizada dos espaçamentos, previsto pelo GOE- q , para matriz de tamanho dois por dois (3.48). Os resultados podem ser conferidos na figura.

Figura 51: Sistemas desordenados e o GOE- q .

A figura 51(a) mostra o ajuste dos dados simulados, utilizando a distribuição generalizada do espaçamento, proposta nesse *ensemble*. Para visualizar melhor o comportamento nas caudas das distribuições, a escala vertical é logarítmica decimal. O valor $q = 1.166$ é aquele em que a distribuição generalizada dos espaçamentos tem o menor valor para o χ^2 , calculado considerando todos os dados, que por sua vez, contribuem com a mesma importância. O valor $q = 1.15258234$ é aquele que determina a distribuição generalizada dos espaçamentos, que tem o valor σ_0 para o seu respectivo desvio padrão. Esse valor é conseguido usando a igualdade (3.68), mas convenientemente modificada para a equação transcendente

$$(7 - 5q) \alpha(q) = \frac{4}{\sigma^2 + 1} . \quad (6.2)$$

O valor do parâmetro α é dado pela igualdade (3.55), no *ensemble* generalizado das matrizes de tamanho mínimo ($N=2$). Portanto é possível obter numericamente o valor do parâmetro entrópico, conhecido o valor do desvio padrão. Diminuindo arbitrariamente o valor do parâmetro entrópico para $q = 1.13$, observa-se que o ajuste continua aceitável. Foram testadas outras distribuições no intervalo $q \in [1.2, 1.166]$, verificando-se que existem infinitas distribuições dos espaçamentos (PL) nesse intervalo, que ajustam os dados simulados. A figura 51(b)

¹Dados simulados cedidos por R. P. A. Lima e M. L. Lyra, ambos da UFAL.

mostra os ajustes superpostos para dois valores do parâmetro entrópico q . Nessa figura, os dois eixos, vertical e horizontal, têm suas escalas lineares.

A importância desses ajustes realizados residem no fato de conseguir descrever as transições de Anderson dos sistemas desordenados complexos, por meio de um *ensemble* da Teoria das Matrizes Aleatórias. Nesse caso, a invariância rotacional é preservada e nenhum vínculo é adicionado. Pode-se considerar inédito, até o presente momento, o procedimento usado para descrever os fenômenos físicos por intermédio do *Ensemble* Ortogonal Generalizado, construído inteiramente nesta tese.

6.2 Outras possíveis aplicações

Uma das possibilidades de aplicação dos resultados desta tese está no estudo das *networks*. Por exemplo, no estudo das distribuições das conexões entre as páginas da internet, por meio dos seus links. As descrições estatísticas das conexões são representadas pelas matrizes aleatórias $A_{N \times N}$, com elementos discretos do tipo binário. A expressão analítica da distribuição das matrizes aleatórias foi obtida no modelo Erdős-Rényi (*ER*). Nesse modelo a distribuição das matrizes é semelhante àquela definida no GOE, na igualdade (2.13) e reescrita por

$$P_{ER}(A) = \frac{1}{z} e^{-\text{tr} A^2} . \quad (6.3)$$

Sendo assim, imediatamente adota-se a lei do semicírculo para distribuição de um dos estados, associados a diagonalização das matrizes A . Por outro lado, existem alguns desvios dessa lei em alguns casos, que são estudados pelos modelos *Small-World* e *Scale-free*. No caso do *Scale-free* (*SF*), tendo em vista a distribuição generalizada das matrizes aleatórias dada na igualdade (4.1), escreve-se

$$P_{SF}(A) = \frac{1}{z} \left[1 + \frac{\beta}{\lambda} \text{tr} A^2 \right]^{-\frac{1}{q-1}} , \quad (6.4)$$

ou então

$$P_{SF}(A; \beta, \lambda) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_0^\infty d\xi \xi^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-\xi} P_{ER}\left(A, \frac{\beta\xi}{\lambda}\right) . \quad (6.5)$$

Imediatamente adota-se uma generalização natural para a densidade de estados, tendo em vista a igualdade (4.33), mas modificada convenientemente para

$$\rho_{SF}(a; \beta, \lambda) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \sqrt{\frac{2\beta}{\lambda}} \int_0^{\frac{\lambda N}{\beta a^2}} d\xi e^{-\xi} \xi^{\lambda-\frac{1}{2}} \rho_{ER}(a; \beta, \lambda) .$$

O parâmetro a é um estado aleatório obtido a partir da diagonalização da matriz A . A função $\rho_{ER}(a; \beta, \lambda)$ é a densidade de estados obtida no modelo *ER*. Os

resultados desse trabalho² são animadores e por isso estão sendo submetidos para publicação em uma revista científica internacional.

Existe esperança que os resultados dessa tese sejam aplicados aos cálculos dos riscos de uma carteira de ações, na área de Finança, estudada atualmente pela Econofísica.

~ o ~ • ~ o ~

²Trabalho de Pós-doc do Dr. J. X de Carvalho, sob supervisão do Prof. M. P. Pato.

Capítulo 7

CONCLUSÃO

O *Ensemble* Ortogonal Generalizado foi construído inteiramente dentro do formalismo da entropia não-extensiva de Tsallis. O primeiro limite estudado foi aquele em que o tamanho da matriz é mínimo, ou seja, a matriz é do tipo dois por dois. Nesse limite, a distribuição das matrizes aleatórias foi exibida explicitamente em função do traço do quadrado da matriz aleatória. A sua normalização restringiu o intervalo de variação do parâmetro entrópico para $] -\infty, \frac{5}{3}[$. A distribuição dos espaçamentos foi obtida analiticamente. O espaçamento médio unitário foi adotado, restringindo ainda mais o intervalo de variação do parâmetro entrópico para $] -\infty, \frac{3}{2}[$. No intervalo em que o parâmetro entrópico é menor que a unidade, existe um valor máximo para os espaçamentos. Esse é o espaçamento de corte. O fator linear do espaçamento da distribuição de Wigner do GOE, que caracteriza a repulsão entre os níveis, é mantido intacto no GOE- q . Esse termo também mantém-se no intervalo em que $q \in [1, \frac{3}{2}]$. O estudo das distribuições de um elemento da matriz indica um comportamento gaussiano no limite em que o parâmetro entrópico assume o valor unitário. No subintervalo em que $q \in [1, \frac{7}{5}[$, a distribuição de um elemento da matriz tem um segundo momento finito e comporta-se aproximadamente, como uma gaussiana. No subintervalo $q \in [\frac{7}{5}, \frac{3}{2}]$, as distribuições de um elemento da matriz não possuem um segundo momento finito, comportando-se aproximadamente como uma distribuição de Lévy. Somente no ponto $q = \frac{3}{2}$, a distribuição de um elemento da matriz é a própria distribuição de Lévy. Provou-se que distribuição de Porter-Thomas para uma componente de um autovetor é a mesma que aquela prevista pelo GOE, para qualquer valor de q . Conclui-se que as simetrias angulares dos autovetores são preservadas no GOE- q .

Existe muito interesse no estudo dos comportamentos das distribuições previstas pelo GOE- q no limite termodinâmico, no qual o tamanho da matriz tende para o infinito. Para realizar esse estudo, é necessário construir o *Ensemble* Ortogonal Generalizado para matrizes de tamanho arbitrário N . Introduz-se naturalmente o parâmetro λ que é uma função do parâmetro entrópico e do tamanho da matriz. Se $\lambda \in] -\infty, -\frac{f}{2}]$, o GOE- q é equivalente ao *ensemble* de traço restrito

(ou limitado). Usando o Método de Campo Médio, prova-se que a densidade de estados é a lei do semicírculo. Esse resultado já tinha sido obtido na tese de doutoramento do Bronk [17]. Se $\lambda \in [0, 1]$, as distribuições de um elemento da matriz não possuem segundos momentos finitos. No limite termodinâmico tais distribuições são semelhantes, do ponto de vista estatístico, às distribuições de Lévy. A respectiva densidade de estado é representada por uma transformada integral da lei de semicírculo, que permite o desconfinamento dos estados. A forma dessa densidade de estados pode ser muito diferente da lei do semicírculo. Se $\lambda \in]1, \infty[$, as distribuições de um elemento da matriz têm comportamentos aproximadamente gaussianos. Para qualquer valor de λ fixado nesse intervalo, no limite termodinâmico, tais distribuições são estatisticamente semelhantes às distribuições gaussianas. No entanto, as densidades de estados são as mesmas que aquelas do intervalo anterior, no qual a expressão analítica é dada por uma transformada integral da lei do semicírculo. No limite $\lambda \rightarrow \infty$, as densidades de estados definidas pelas transformadas da lei do semicírculo tendem para o semicírculo.

A distribuição dos espaçamentos prevista no GOE-q de matrizes aleatórias de tamanho dois por dois tem aplicação comprovada na descrição de fenômenos em sistemas eletrônicos desordenados. O GOE-q de matrizes de tamanho N é aplicado no estudo de problemas de redes da internet, conhecido por *networks*. Com o sucesso das aplicações anteriores, acredita-se em novas possibilidades de aplicações em variadas áreas do conhecimento científico.

Uma conclusão mais geral reside em considerar o GOE-q a maneira mais natural e mais correta de generalização do GOE.

~ o ~ • ~ o ~

Capítulo 8

APÊNDICE

Este apêndice contém duas partes de suma importância para este trabalho. A primeira parte é um formulário utilizado algumas vezes nos cálculos efetuados. A segunda parte contém os dois algoritmos usados nos programas de simulações numéricas.

8.1 Formulário

Algumas igualdades matemáticas são listadas a seguir com o objetivo de apoiar a leitura contínua da tese. Admitiu-se também que a tese poderia ter a maior autosuficiência possível, restringindo a necessidade das consultas nas obras bibliográficas.

8.1.1 Função Beta

$$B(x, y) = \int_0^{\infty} du \frac{u^{x-1}}{(1+u)^{x+y}} \quad x > 0, \quad y > 0, \quad (8.1)$$

ou então

$$B(x, y) = \int_0^1 dt t^{x-1} (1-t)^{1-y} \quad x > 0, \quad y > 0. \quad (8.2)$$

8.1.2 Função Gama

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} dt t^{x-1} e^{-t} \quad x > 0. \quad (8.3)$$

Para os argumentos negativos

$$\Gamma(z) = \frac{\pi}{\operatorname{sen}(\pi z) \Gamma(1-z)}. \quad (8.4)$$

8.1.3 Relação entre as funções Beta e Gama

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x) \Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} . \quad (8.5)$$

8.1.4 Transformada de Fourier

$$F(\gamma) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dt \cos(\gamma t) f(t) . \quad (8.6)$$

8.1.5 Funções de Bessel modificadas

As funções de Bessel e Neumann satisfazem a equação de Helmholtz: $\nabla^2 \psi + k^2 \psi$, em coordenadas cilíndricas. As soluções da equação diferencial dos fenômenos de difusão $\nabla^2 \Psi - k^2 \Psi$, são as funções de Bessel modificadas, $I_\nu(y)$ e $K_\nu(y)$. Uma delas é escrita por

$$K_\nu(y) = \frac{\Gamma(\nu + \frac{1}{2})}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2}{y}\right)^\nu \int_0^\infty d\tau \frac{\cos(\tau y)}{(1+\tau)^{\nu+\frac{1}{2}}} \quad (8.7)$$

e a outra é dada por

$$I_\nu(y) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!(s+\nu)!} \left(\frac{y}{2}\right)^{2s+\nu} , \quad (8.8)$$

ou então

$$I_{-\nu}(y) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!(s-\nu)!} \left(\frac{y}{2}\right)^{2s-\nu} . \quad (8.9)$$

8.1.6 Relação entre as funções de Bessel modificadas

$$K_\nu(y) = \frac{\pi}{2} \left[\frac{I_{-\nu}(y) - I_\nu(y)}{\sin \pi \nu} \right] . \quad (8.10)$$

8.1.7 Distribuição de Lévy ([21])

$$L(h_{11}, \psi, \eta) = \frac{1}{\pi} \int dk \cos(kh_{11}) e^{-\eta k^\psi} . \quad (8.11)$$

8.1.8 Função Hipergeométrica confluyente

$$M(a, c; x) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \int_0^1 dt e^{xt} t^{a-1} (1-t)^{c-a-1} \quad R(c) > R(a) > 0 . \quad (8.12)$$

8.1.9 Stirling

$$\Gamma(v+1) \cong \left(\frac{v}{e}\right)^v \sqrt{2\pi v} . \quad (8.13)$$

8.1.10 Elemento de volume de uma hipersfera

$$dV = 2 \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2})} R^{n-1} dR . \quad (8.14)$$

8.2 Algoritmo Metropolis

O algoritmo usado, para gerar as matrizes aleatórias, baseia-se no método da rejeição. Usa-se um gerador aleatório de valores entre zero e um, com distribuição constante. Primeiramente, geram-se f valores aleatórios e independentes $h_i \in [0, 1]$ que são guardados no vetor $N_1 = (h_1, \dots, h_f)$. A seguir define-se outro vetor auxiliar $N_2 = N_1$.

O loop do programa pode ser descrito em três etapas. São elas:

1) Todos os elementos do vetor N_1 são modificados:

$$N_1 = (h_1 + \delta_1, \dots, h_f + \delta_f) ; \quad (8.15)$$

2) Calculam-se os traços usando os elementos do vetor N_1

$$s = \sum_{i=1}^N (h_i + \delta_i)^2 + 2 \sum_{j=N+1}^f (h_j + \delta_j)^2 \quad (8.16)$$

e também os elementos do vetor N_2

$$r = \sum_{i=1}^N h_i^2 + 2 \sum_{j=N+1}^f h_j^2 ; \quad (8.17)$$

3) Algoritmo de rejeição.

3a) Efetua-se a divisão: $y = \frac{P(s)}{P(r)}$, na qual usa-se a distribuição generalizada das matrizes $P(H)$ definida na igualdade (4.1);

3b) Gera-se um valor aleatório μ ;

3c) Efetua-se a seguinte comparação:

se $y > \mu$ então N_2 recebe os elementos de N_1
senão N_1 recebe os elementos de N_2 .

Repete-se várias vezes o algoritmo acima e, a partir de um certo valor, aceita-se o vetor N_2 , que por sua vez vai determinando as respectivas matrizes aleatórias.

8.3 Algoritmo ACB|MPP

Esse algoritmo gera as matrizes aleatórias usando apenas os resultados desenvolvidos nessa tese. Usa-se inicialmente uma idéia semelhante ao do desdobramento do espectro, mas adaptada para os elementos da matriz:

$$y_1 = \int_0^{h_1} d\bar{h} P(\bar{h}) . \quad (8.18)$$

A variável y_1 varia no intervalo $[-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}]$ e obedece a distribuição constante. Nota-se que $P(h)$ pode ser uma distribuição qualquer, desde que a integral exista. Se a distribuição for aquela dada pela igualdade (4.9), ou de maneira geral

$$P(h) = \frac{C}{(1 + h^2)^\eta} , \quad (8.19)$$

então é possível identificar a integral em (8.18) com uma função Beta incompleta $B(\eta, h_1)$. O valor do limite superior da integral na igualdade (8.18) é o primeiro elemento h_1 , que é determinado obtendo numericamente a raiz da equação

$$B(\eta, h_1) - y_1 = 0 . \quad (8.20)$$

A seguir, dado esse primeiro elemento, determina-se o outro elemento por meio da igualdade

$$y_2 = \int_0^{h_2} d\bar{u} P(\bar{u} | h_1) . \quad (8.21)$$

A variável y_2 também varia no intervalo $[-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}]$ e também obedece à uma distribuição constante. A distribuição $P(u | h)$ é a distribuição da variável u , condicionado ao valor previamente determinado de h . Esses dois passos já são suficientes para estabelecer um processo de repetição em que, todos os elementos da matriz são determinados e as corretas correlações são inseridas automaticamente. Todos elementos da matriz são determinados por esse algoritmo sabendo-se que, a distribuição das matrizes aleatórias pode ser escrita por meio de um produto de distribuições condicionadas à partir da sua própria expressão analítica:

$$P(h_1, \dots, h_f) = \left[\prod_{n=2}^f P(h_n | h_1, \dots, h_{n-1}) \right] P(h_1) , \quad (8.22)$$

em que as distribuições condicionadas são obtidas a partir da distribuição de um número arbitrário de elementos de uma matriz $P(h_1, \dots, h_n)$ escrita de uma forma

genérica

$$P(h_n | h_1, \dots, h_{n-1}) = \frac{\bar{C}}{\left(1 + \alpha \sum_{i=1}^{n-1} h_i^2\right)^{\lambda + \frac{n}{2}}} \frac{1}{\left[1 + \frac{\alpha}{\left(1 + \alpha \sum_{i=1}^{n-1} h_i^2\right)} h_n^2\right]^{\lambda + \frac{n}{2}}} . \quad (8.23)$$

Essa igualdade pode ser identificada com a distribuição de um único elemento dada na igualdade (8.19), reconhecendo-se que

$$\eta = \lambda + \frac{n}{2} , \quad (8.24)$$

e que as variáveis se relacionam pela igualdade

$$h = h_n \sqrt{\frac{\alpha}{1 + \alpha \sum_{i=1}^{n-1} h_i^2}} , \quad (8.25)$$

considerando que todos os elementos da somatória são conhecidos. Nesse caso, as constantes se relacionam por intermédio da igualdade

$$C = \frac{\bar{C}}{\left(1 + \alpha \sum_{i=1}^{n-1} h_i^2\right)^{\lambda + \frac{n}{2}}} . \quad (8.26)$$

Com este algoritmo os resultados são excelentes e as distribuições teóricas, determinadas nesta tese, são inteiramente verificadas.

~ o ~ • ~ o ~

Bibliografia

- [1] S. R. A. Salinas, *Introdução à Mecânica Estatística*, Edusp (1999).
- [2] M. P. Pato, *Um Ensemble Ortogonal Deformado para Sistemas Semi-Caóticos*, tese de Livre-Docência (1990).
- [3] C. Tsallis, *Journal Statistical Physics* **52**, 479 (1988).
- [4] L. Laloux, P. Cizeau, J-P Bouchaud and M. Potters, *Physical Review Letters*, 83(7), 1467 (1999).
- [5] J-P Bouchaud, A. Matacz and M. Potters, *Physical Review Letters*, 87(22), 228701 (2001).
- [6] J-P Bouchaud, *Physica A* 313 (2002) 238-251.
- [7] E. Bogomolny, O. Bohigas and M. P. Pato, *Physical Review E*, 55, 6707 (1997).
- [8] O. Bohigas in *Chaos and Quantum Physics*, ed. by M.-J. Giannini, A. Voros and J. Zinn-Justin, North Holland (1991);
- [9] A. C. Bertuola, *Ensemble Ortogonal Gaussiano e o Formalismo de Wigner*, *Trabalho de Iniciação Científica*(1998).
- [10] M. L. Mehta, *Random Matrices*, Academic Press (1990).
- [11] O. J. Farrell and B. Ross, *Solved Problems: Gamma and Beta Functions, Legendre Polynomials, Bessel Functions, The Macmillan Company* (1963).
- [12] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press (1995)
- [13] T. Guhr, A. Müller-Groeling and H. A. Weidenmüller, *Random-Matrix Theories in Quantum Physics: Common Concepts*, *Phys. Rep.* 299, 189 (1998).
- [14] *Handbook of Mathematical Functions*, edited by M. Abramowitch and I. A. Stegun, Dover (1972).

- [15] P. Cizeau and J-P Bouchaud, *Physical Review E*, 50(3), 1810 (1994).
- [16] G. L. Vasconcelos, *A Guided Walk Down Wall Street: an Introduction to Econophysics*, Notas de aulas da Escola Brasileira de Mecânica Estatística (2004).
- [17] B. V. Bronk, Thesis, Princeton University (1964).
- [18] C. Tsallis, R. S. Mendes and A. R. Plastino, *Physica A* 261, 534 (1998).
- [19] R. Balian, *Nuovo Cimento*, Vol. B57, 183 (1968).
- [20] C. Tsallis, S. V. F. Levy, A. M. C. Souza and R. Maynard, *Physical Review Letters*, 75, 3589 (1995).
- [21] T. J. P. Penna, P. M. C. de Oliveira, J. C. Sartorelli and R. D. Pinto, *Physical Review E*, 52, 2168 (1995).
- [22] M. P. Pato, *Physical Review E*, 61, 3291, (2000).
- [23] E. P. Wigner, *Nobel Lecture*, December 12, 1963.
- [24] M. S. Hussein and M. P. Pato, *Physical Review Letters*, 80, 1003(1998).
- [25] R. P. A. Lima, R. da Cruz, J. C. Cressoni and M. L. Iyrya, *Physical Review B*, 69, 165117-1 (2004).
- [26] C. Tsallis, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 22, 156 (2000).
- [27] E. P. Borges, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 21, 453 (1999).
- [28] G. Wilk and Z. Wlodarczyk, *Physical Review Letters*, 84, 2770 (2000).
- [29] M. P. Pato, *100 anos de Física Quântica*, Livraria da Física Editora (2001).
- [30] A. C. Bertuola e M. P. Pato, *Tendências da Física Estatística no Brasil*, pág. 200, Livraria da Física Editora, (2003).

~ o ~ • ~ o ~