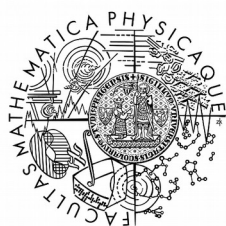


Univerzita Karlova
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

2020

Richard Škultéty



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Richard Škultéty

**Rozdělení energetických vzdáleností mezi hladinami kvantových
systémů**

Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí bakalářské práce: **Ing. Augustovičová Lucie, Ph.D.**

Studijní program: **Fyzika**

Studijní obor: **Obecná fyzika**

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona.

V dne.....

podpis:

Rád bych poděkoval paní doktorce Lucii Augustovičové za zadání zajímavé práce a za pomoc s vypracováním a doporučení vhodné literatury. Dále bych rád poděkoval doktoru Petru Dohnalovi za konzultace. Nakonec Panu doktorovi Pavlu Stránskému za přednášky na téma kvantového chaosu, v rámci semináře klasický a kvantový chaos, které pomohly problematiku pochopit.

Název práce: **Rozdělení energetických vzdáleností mezi hladinami kvantových systémů**

Autor: **Richard Škultéty**

Katedra / Ústav: **Katedra chemické fyziky a optiky**

Vedoucí bakalářské práce: **Ing. Augustovičová Lucie, Ph.D.**

Abstrakt:

Cílem práce je seznámit se s tématem kvantového chaosu a metodami pro jeho kvantifikaci. V první kapitole představím pojem chaosu jak v klasickém případě, tak v kvantovém. Představím metodu NNS, která studuje projevy kvantového chaosu jako korelace na spektru. V druhé kapitole představím základní metody pro práci s daty v podobě hustoty pravděpodobnosti. Ve třetí kapitole se budu věnovat metodám, které jsou specifické pro kvantový chaos. Pro simulaci kvantově chaotických systému představím základy teorie náhodných matic. Představím metodu unfolding a budu studovat distribuce NNS pro simulovaná spektra. Pro kvantifikaci chaosu představím Brodyho distribuci. V poslední části práce aplikuji výše zmíněné metody na reálná spektra.

Klíčová slova:

- Kvantový chaos / chaologie
- Rozdělení vzdálenosti nejbližších susedů (NNSD)
- Náhodné matice
- Brodyho distribuce

Title: **Level spacing distribution of quantum systems**

Author: **Richard Škultéty**

Department: **Department of Chemical Physics and Optics**

Supervisor: **Ing. Augustovičová Lucie, Ph.D.**

Abstract:

The aim of this work is to get acquainted with the topic of quantum chaos and statistical methods used to quantify it. In the first part of this work I will show the definition of both classical and quantum chaos. I will introduce NNS method, which studies quantum chaos as correlations between levels in the spectrum. In the second part of my work I will describe basic methods used to work with data in a form of probability density. In the third part this work I will focus on methods that are specific for quantum chaos. To simulate a quantum chaotic system I will use the basics of random matrix theory. I will introduce unfolding and I will study the distribution of NNS for simulated spectra. To quantify quantum chaos I will use Brody distribution. In the last part of this work I will apply above mentioned methods on spectra of real particles.

Keywords:

- Quantum chaos / chaologi
- Nearest neighbor spacing distribution (NNSD)
- Random matrix
- Brody distribution

Obsah

Úvod.....	4
1 Uvedení do problematiky chaosu.....	5
1.1 Klasický chaos.....	5
1.1.1 Zavedení Klasického chaosu.....	5
1.1.2 Dynamický systém.....	6
1.1.3 Citlivost na počátečních podmínkách.....	7
1.1.4 Topologicky tranzitivní.....	7
1.1.5 Husté periodické orbity.....	7
1.1.6 Integrabilita.....	7
1.1.7 Lyapunovovy exponenty.....	8
1.2 Kvantový chaos.....	8
1.2.1 Důkaz linearity kvantové mechaniky.....	9
1.2.2 Zavedení kvantového chaosu.....	10
1.2.3 Chaotické systémy.....	12
1.2.4 Brodyho funkce.....	14
1.3 Kvantový chaos v experimentech.....	14
2 Matematické metody použité v práci.....	15
2.1 Pravděpodobnost na spojitě sadě dat.....	15
2.2 Generování pseudonáhodné sady dat.....	18
2.3 Fitování funkcí metodou χ^2	19
2.4 Test Fitovacího nástroje pro Brodyho funkci.....	20
3 Teorie náhodných matic.....	27
3.1 Soubory Gaussovsky náhodných matic (GOE, GUE, GSE).....	27
3.2 Generování GOE matice.....	28
3.3 Unfolding.....	29
3.4 Generování chaotického setu z matice GOE.....	30
4. Kvantifikace chaosu na reálných datech.....	31
4.1 Atomy Dy.....	31
4.2 Molekuly Dy ₂	33
Závěr.....	39
Literatura.....	40

Úvod

Práce se zabývá studiem distribuce vzdáleností mezi hladinami kvantových systémů dále NNSD (Nearest Neighbor Spacing Distribution). NNSD je sada dat, ze které lze velmi dobře vyčíst, zda mezi hladinami ve spektru existuje nějaká repulze nebo ne. Takto jsou data NNSD velmi užitečná pro studium kvantového chaosu, který se vyznačuje korelacemi ve spektru.

Práci začínám zavedením chaosu nejprve v klasickém případě, pak představím proč tato definice nelze zavést v čistě kvantovém případě. Kvantový chaos budu v práci chápat jako existenci korelací ve spektru. Kvantový chaos v tomto významu nejlépe uvedou 2 základní domněnky. Wignerova domněnka stanovuje že spektra kvantově chaotických systémů se chovají stejně jako spektra náhodných matic, co nám umožňuje simulovat kvantově chaotické systémy. Bohigasova domněnka což nám ukazuje spojitost mezi klasickým chaosem a kvantovým chaosem.

V další kapitole práce se budu věnovat základním statistickým pojmům a metodám, které jsou nutné pro zpracování a fitování dat. Představím pojem hustoty pravděpodobnosti a některé metody pro generaci testovacích sad dat. Nakonec aplikuji použitou metodu pro fitování a hodnocení kvality fitu na sestavení testovacích sad dat pro Brodyho distribuci.

Následně představím metody specifické pro studium rozdělení vzdálenosti nejbližších sousedů. Především Brodyho rozdělení a unfolding. Fitování rozdělení vzdálenosti nejbližších sousedů Brodyho funkcí nám umožní kvantifikovat chaos v systému. Unfolding připraví data do tvaru, který je vhodný pro fit Brodyho funkcí.

Nakonec výše zmíněné metody aplikuji na reálná data a provedu srovnání s simulovanými systémy.

1 Uvedení do problematiky chaosu

Tato kapitola práce má za účel seznámit čtenáře s historií teorie kvantového chaosu a ve stručnosti zadefinovat termín chaosu nejprve v klasickém případě a následně v kvantovém. Nejprve se budu věnovat klasickému případu, kde je chaos dobře zadefinovaný a je jednoduché si ho představit a následně přejít do kvantového případu. Klasický chaos vychází z neintegrability klasické mechaniky, díky které můžeme dostávat případy, kdy v systému zaniká periodičita a dostáváme nestabilní trajektorie, na kterých i malá odchylka na začátku může po čase způsobit podstatnou odchylku. Není možné zavést kvantový chaos stejným způsobem jako v klasickém případě, jelikož kvantová mechanika je jak integrabilní, tak lineární a chaos v klasickém slova smyslu je v kvantovém případě potlačen.

1.1 Klasický chaos

1.1.1 Zavedení Klasického chaosu

Nutnost zavádět termín chaos vychází z jevu, kdy i pro kompletně deterministické systémy není možné předpovědět jejich časový vývoj, pokud naše původní měření má sebemenší odchylku. Toto se často nazývá efekt motýlích křídel. Zavedení chaosu¹ ve fyzice se připisuje matematikovy J.H. Poincaré, který upozornil na chaotičnost newtonovské mechaniky. Tradiční ukázkou chaotického systému je dvojitě kyvadlo nebo problém 3 těles, kdy je jednoduché tyto případy nasimulovat, ale jakákoliv odchylka v počátečních podmínkách vede na úplně jiné trajektorie, než kdyby počáteční podmínky byly přesné.²

Standardně se chaotický systém charakterizuje jako systém, který je:

1. Citlivý na počáteční podmínky
2. Topologicky tranzitivní
3. Má husté periodické orbity

Tuto definici formuloval Robert Luke Devaney^[1] a i přesto, že není žádná universálně uznávaná definice, tak tato definice je nejčastěji používaná v případě, že potřebujeme chaos jednoznačně zadefinovat.

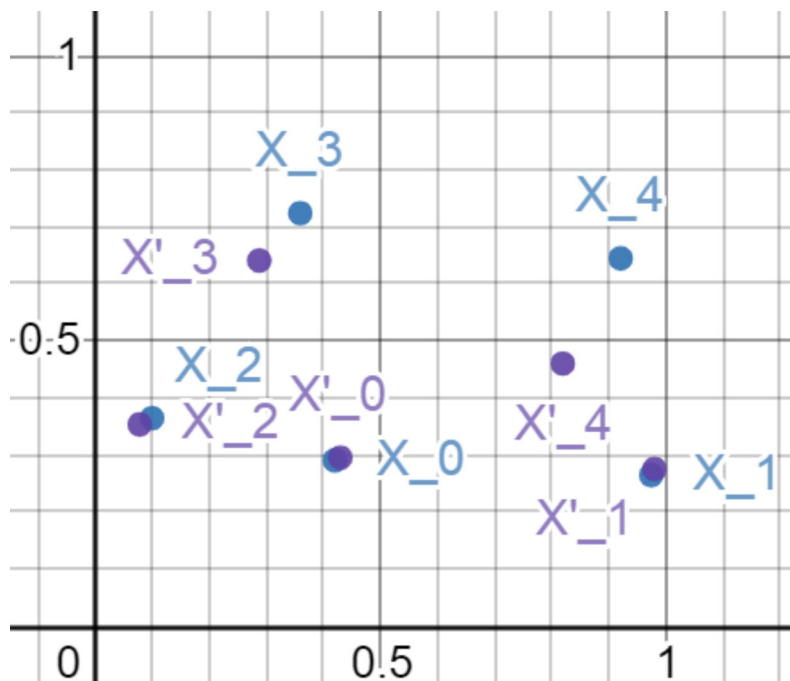
Jako příklad chaotického systému můžeme použít mapu, která vznikne pokud si vezmeme bod $[x,y]$ z intervalu $x,y \in [0,1]$ a aplikujeme na něj následující operátor f .

$$\begin{aligned} f: \mathbb{R}^* \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{R}^* \mathbb{R} \\ x &\rightarrow 4x(1-x) \bmod 1 \\ y &\rightarrow (x+y) \bmod 1 \end{aligned}$$

1 Termín chaos nebyl přímo zavedený Poincarém, ale upozornil na problematiku systému, které jsou citlivé na počáteční podmínky.

2 Pro ilustraci připínám odkaz na simulaci problému 3 těles <https://cloud.anylogic.com/model/f1999d97-8de2-4804-9940-5ae261d7ad86?mode=SETTINGS>, kde původní stav je stabilní ale jakákoliv sebemenší změna v počátečních podmínkách vede na nestabilní stav.

Pokud tuto operaci několikrát aplikujeme na dvojici bodů $X = [x, y]$ a $X' = [x + \delta, y + \sigma]$, kde δ a σ značí nějakou malou výchylku, tak můžeme vidět chaotické chování systému, kdy s počtem iterací f nám začne významně růst vzdálenost mezi body X a X' . Demonstruji pomocí programu <https://www.desmos.com/>, kde jsem provedl 4 iterace f viz obrázek 1.³



Obrázek 1: Demonstrace chaotického chování na 2D mapě. Východní body jsou X_0 a X'_0 . Číslování bodů značí počet kolikrát byl aplikován operátor f .

1.1.2 Dynamický systém

Citlivostí na počátečních podmínkách se rozumí to, co jsem výše popisoval jako efekt motýlích křídel. Pro rigorózní definici chaosu potřebujeme rigorózní definici výše zmíněných termínů, a proto se zde budu věnovat zadefinování základních termínů pro klasický chaos. Chaos je termín, co se zavádí na dynamických systémech, které si zadefinují jako dvojici množiny bodů X a operátoru f , který působí $f: X \rightarrow X'$, pak (X, f) je dynamický systém. Máme 2 různé situace, spojitý případ, kdy f je funkce času a nespojitý případ, kdy iterujeme f na X několikrát a dynamický vývoj, pak máme jako $f^n X$, v tomto případě se bavíme o logistické mapě jako demonstrováno na příkladě výše.

3 Příkladám nastavení desmosu pro vytvoření ilustrace, pokud by si někdo chtěl pohrát z vstupními parametry nebo přidat více iterací <https://www.desmos.com/calculator/55efesgrmo>

1.1.3 Citlivost na počátečních podmínkách

Teď když jsme zdefinovali dynamické systémy, můžeme definovat citlivost na počáteční podmínky. Mějme dynamické systémy (X_1, f) , (X_2, f) , které se vyvíjejí podle stejného operátoru f . Mezi stavy X_1 a X_2 zdefinujeme operátor vzdálenosti $d(X_1, X_2) \rightarrow d$, kde d je číslo, které značí nejmenší vzdálenost mezi trajektoriemi, nebo v případě mapy vzdálenost mezi body $z X$ na mapě. Dynamický systém nazveme citlivý na počátečních podmínkách pokud^[1]:

$$\exists \delta > 0 \text{ takové, že pro } \forall X_1, X_2; 0 < d(X_1, X_2) = \varepsilon \ll \delta \quad \exists t > 0 \text{ pak} \\ d(f(t)X_1, f(t)X_2) > \delta.$$

Pro mapy mluvíme o $f^n X$ a všech $n > 0$. Citlivost vychází z nelinearity, která může nastat pro klasické systémy.

1.1.4 Topologicky tranzitivní

Topologická tranzitivita popisuje vlastnost dynamického systému, která popisuje tendenci shluku nedalekých bodů se rozprostřít po transformaci. Matematicky to zdefinujeme následovně:

Mějme dynamický systém (X, f) a neprázdné otevřené množiny $V, U, W \in X$, pak existuje^[1] $n > 0$ takové, že

$$f^n V = W \Rightarrow U \cap W \neq \emptyset$$

pak nazveme f Topologicky tranzitivní. Touto definicí se myslí, že pokud si zvolíme libovolné 2 neprázdné otevřené množiny V, U . Tak pokud vyvíjíme množinu V pomocí operace f , tak opakováním tohoto vývoje můžeme vždy dostat nenulový průnik mezi množinou U a množinou, která vznikne vývojem V pomocí f .

1.1.5 Husté periodické orbity

Periodickou orbitou nazveme kombinaci bodu A a operátoru f takový, že pokud máme dynamický prostor (X, f) a bod $A \in X$ a existuje $n > 0$ takové, že $f^n A = A$. Husté periodické orbity má dynamický, prostor pokud můžeme najít periodickou orbitu v každé neprázdné otevřené podmnožině X .

1.1.6 Integrabilita

Dalším důležitým termínem pro diskutování o klasickém chaosu je integrabilita. Integrabilní systémy sledují pouze stabilní trajektorie a proto nevykazují chaotické chování. Integrabilní systém je systém takový, který má integrál pohybu na, každý stupeň volnosti. Kde integrál pohybu je funkce F taková, že její Poissonova závorka s hamiltoniánem H je nulová, $\{F, H\} = 0$. Další podmínkou integrability je nulovost Poissonových závorek pro všechna $i, j \{F_i, F_j\} = 0$.^[2]

1.1.7 Lyapunovovy exponenty

Ještě nakonec než přejdeme k kvantovému případu, zmíním metriku, která se zavádí pro charakterizaci chaotického chování ve studovaném systému.^[2] Zavedeme odchylku jako $\delta x(t)$. Co značí vzdálenost mezi trajektoriemi $x(t)$ a $x'(t)$, kdy odchylku v čase 0 můžeme vyjádřit jako $\delta x(0)$, pak pro chaotické systémy máme:

$$\|\delta x(t)\| \approx e^{\lambda t} \|\delta x(0)\| \quad (1.1)$$

Hodnotu λ pak nazveme Lyapunovův exponent a definuji ho podle vzorce (1.2)

$$\lambda \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|\delta x(t)\|}{\|\delta x(0)\|} \quad (1.2)$$

Lyapunovův exponent je tedy veličina, která udává rychlost exponenciálního růstu odchylky mezi trajektoriemi a pro regulární trajektorie je nulová. U chaotických systémů dostáváme kladné hodnoty, což naznačuje exponenciální růst odchylky v chaotických systémech.

Ještě je důležité popsat situaci, kdy máme uzavřený systém jako v výše uvedeném případě. V uzavřeném systému nemá odchylka možnost růst do nekonečna, a proto se zde zavádí alternativní limita. Zavedeme veličinu t_{\max} , která značí čas za, který časový vývoj $\delta x(t)$ dosáhne svého maxima. Limita (1.2) se v uzavřeném systému pak zavádí jako limita $0 << t < t_{\max}$ čímž se myslí, že uvažujeme „nekonečný růst“ dokud platí $t < t_{\max}$. Hodnota t_{\max} je závislá na počáteční odchylce a zmenšením $\delta x(0)$ nám roste t_{\max} .^[2]

1.2 Kvantový chaos

V kvantovém případě nemůžeme používat stejnou definici jako v klasickém. Pro to, aby systém byl závislý na počátečních podmínkách potřebujeme nelineární systém, aby vznikla odchylka s nenulovým Lyapunovovým exponentem. Linearita kvantových systémů vyplývá z tvaru časového vývoje ketu vlnové funkce. V následující kapitole si dokážeme, že pro kvantové systémy nemůžeme zavést analog k Lyapunovovým exponentům.

V této kapitole nejprve přednesu důkaz, že v čistě kvantových systémech nelze zavést klasická představa chaosu. Poté uvedu teorii, která kvantifikuje chaos na základě korelací mezi jednotlivými hladinami ve spektru systému a představím základní statistické metody, které umožňují chaos kvantifikovat.

1.2.1 Důkaz linearity kvantové mechaniky

Mějme normalizovaný stav v čase 0 popsaný ketem $|\psi(0)\rangle$ a ortogonální výchylku $|\psi_{\perp}(0)\rangle$, kde míru výchylky budu značit ε . Po normalizaci značíme perturbovaný vektor jako $|\xi(0)\rangle$ a dostaneme ho jako:

$$|\psi(0)\rangle + \varepsilon|\psi_{\perp}(0)\rangle \rightarrow \text{normalizace} \rightarrow |\xi(0)\rangle = \sqrt{1-\varepsilon^2} |\psi(0)\rangle + \varepsilon|\psi_{\perp}(0)\rangle \quad (1.3)$$

Předpokládáme že jsou splněny podmínky ortogonalit a normalizace ve všech časech:

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle &= \langle \psi_{\perp}(t) | \psi_{\perp}(t) \rangle = \langle \xi(t) | \xi(t) \rangle = 1 \\ \langle \psi(t) | \psi_{\perp}(t) \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (1.4)$$

Dále vezměme v úvahu operátor časového vývoje ketu pro systém s hamiltoniánem nezávislém na čase \hat{H} . Ket v čase t je pak dle vzorce (1.5).

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{H}t} |\psi(0)\rangle \quad (1.5)$$

Časový vývoj $|\xi(0)\rangle$ probíhá stejně.

Zadefinujeme vektor deviace jako:

$$|\delta(t)\rangle = |\xi(t)\rangle - |\psi(t)\rangle \quad (1.6)$$

Kde pak můžeme dopočítat jeho normu jako:

$$|\delta(t)| = \sqrt{\langle \delta(t) | \delta(t) \rangle} = \sqrt{(\sqrt{1-\varepsilon^2}-1)^2 \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle + \varepsilon^2 \langle \psi_{\perp} | \psi_{\perp} \rangle} \approx \varepsilon \sqrt{1 + \frac{\varepsilon^2}{4}} \quad (1.7)$$

Ukázali jsme, že velikost stavového vektoru deviace neroste s časem a proto Lyapunovův exponent bude vždy nulový.

1.2.2 Zavedení kvantového chaosu

Pro zavedení chaosu na kvantovém systému máme 2 přístupy. Semi-klasický způsob, kdy zkoumáme kvantové systémy v klasické limitě a můžeme narážet na efekty klasického chaosu a druhým přístupem je studium spektrálních korelací. Semi-klasický přístup přináší mnoho užitečných výsledků, převážně na systémech, které můžeme popsat jak klasicky tak kvantově, ale nelze aplikovat na čistě kvantové případy, a proto, když se mluví o kvantovém chaosu, tak se většinou mluví o studiu spektrálních korelací.^[3]

Ve studiu spektrálních korelací se díváme na spektra systémů s korelovanými vlastními čísly. Dá se dokázat, že pokud zavedeme kvantovou analogii k integrabilitě kvantového systému⁴, tak rovnost počtu integrálů pohybu k počtu stupňů volnosti znamená, že kvantová čísla systému nejsou korelovaná.^[2] Zde už můžeme vidět, jak je korelace kvantových čísel analogická k klasické představě chaosu. Problém tohoto přístupu je, že nemá nic společného se základní myšlenkou klasického chaosu a netýká se časového vývoje deviace. Kvůli tomuto Michael Berry navrhl nepoužívat termín *Quantum Chaos*, ale nazývat tento jev jako *Quantum Chaology*^[3]. V této práci se budeme věnovat spektrálnímu přístupu k zavádění chaosu v kvantových systémech.

Korelace ve spektru chaotických systémů se projevují jako „odpuzování“ jednotlivých hladin (vlastních čísel). Je nutné zavést matematické veličiny, které toto odpuzování kvantifikují a můžeme je použít pro zavedení veličin, které měří chaoticitu systému. Nejčastěji se setkáváme s veličinou NNS (nearest neighbor spacing), která měří rozdíl mezi nejbližšími dvěma hladinami spektra.

4 Analogicky ke klasické integrabilitě můžeme zavést kvantovou verzi. Kvantovou verzi dostaneme nahrazením Poissonových závorek za komutátory. Analog integrálu pohybu je pak sada operátorů, které mezi sebou komutují a komutují s Hamiltoniánem systému.

Zavedení NNS:

Nechť e_n je uspořádaná posloupnost hladin spektra (energií, velikostí vlastních čísel a pod), pak NNS je posloupnost s_n definovaná jako :

$$s_n = e_{n+1} - e_n \quad (1.8)$$

Je jednoduché vidět jak se „odpuzování“ hladin projeví na hodnotě s_n . Spíše než NNS nás zajímá distribuce NNS (NNSD) co je funkce $p(s)$, která počítá pravděpodobnost nálezu další hladiny ve vzdálenosti s . Chaoticitu můžeme pak systémům přiřazovat na základě tvaru NNSD.

NNSD nekorelovaného spektra odpovídá NNSD sady náhodně generovaných čísel podle uniformní distribuce a má tvar Poissonovy distribuce⁵.^[4]

$$p(s) = e^{-s} \quad (1.9)$$

Pro kvantifikování „odpuzování“ hladin se dají zavést i alternativní veličiny jako například poměr následujících vzdáleností nejbližších sousedů RoCLS (Ratio of Consecutive Level Spacings), kterou získáme z NNS jako:^[5]

$$r_n = \frac{s_n}{s_{n-1}} \quad (1.10)$$

$$\tilde{r}_n = \min\left(r_n, \frac{1}{r_n}\right) \quad (1.11)$$

Tvar popsaný (1.11) se používá častěji, jelikož nese stejnou informaci a nediverguje v případech $s_i = 0$.

RoCLS se konkrétně zavádí pro systémy, kdy je moc početně náročné provést unfolding (metoda která je nutná pro práci s NNS, kterou představím později v práci).^[5] Kromě toho, že není nutné data unfoldovat, tento přístup přináší i tu výhodu, že je možné analyticky zavést střední hodnotu $\langle r \rangle$, která může sloužit jako kvantifikátor chaosu.

V této práci se budeme převážně zabývat hodnotou NNS a její distribucí NNSD.

5 Standardně se Poissonova distribuce uvádí jako $p(k; s) = \frac{s^k}{k!} e^{-s}$ v našem případě $k = 0$ a v kontextu kvantového chaosu budeme jako Poissonova distribuce říkat případu $k=0$.

1.2.3 Chaotické systémy

Při studiu kvantového chaosu se zaměřujeme na studium vlastností celého spektra a ztrácíme informace o jednotlivých hladinách. Pro takovýto přístup používáme statistické metody, zejména teorii náhodných matic. Nutnost pro zavedení kvantového chaosu přišla při experimentech z jaderné fyziky, kde jsme dostávali Hamiltoniány tak složité, že můžeme prvky maticové reprezentace Hamiltoniánů považovat za náhodná čísla. Jediná věc, kterou můžeme zavést i pro komplikované systémy, jsou základní symetrie, které se dají dobře zahrnout do teorie náhodných matic, kdy symetrie v systému odpovídají vlastnostem maticových reprezentací Hamiltoniánů. V kapitole o teorii náhodných matic nalezneme jaká vlastnost matice odpovídá daným symetriím.

Zavedení aplikace Teorie náhodných matic ve fyzice se připisuje F.J. Dysonovi a E. Wignerovi a v této práci budeme popisovat statistické metody, které zavedli pro aplikaci teorie náhodných matic na kvantově chaotické systémy, studujeme podobnosti mezi spektry chaotických systémů a spektry náhodných matic. Konkrétně matic s elementy, které generujeme podle Gaussovské distribuce. Takto generované soubory budeme nazývat Gaussovské soubory a budeme ještě specifikovat 3 případy, které odpovídají 3 obecným symetriím systému a tudíž 3 typům transformace, vůči kterým je matice invariantní. Spektra takto generovaných náhodných matic vykazují stejné „odpuzování“ jako chaotické systémy, jak bylo popsáno E. Wignerem v Teorému 1.

Teorém 1: Wignerova domněnka^[4]:

Suppose we have a complicated and complex system with (often high) unknown number of degrees of freedom (such as a highly excited atomic nucleus) and we do not know anything about the interaction among the constituents. The only thing we know about the Hamiltonian is the symmetry it satisfies (rotational invariance, time-reversal invariance etc.). Then a sequence of consecutive energy levels with the same spin and parity will have the same statistical properties as the spectrum of a random matrix whose elements are independent numbers taken from the Gaussian normal distribution. Levels of different spin and parity are not correlated

Předpokládejme, že máme komplikovaný a komplexní systém s (často velkým) neznámým počtem stupňů volnosti (jako vysoce excitovaná jádra atomů) a nevíme nic o interakcích mezi jeho prvky. Jediná věc, kterou víme o Hamiltoniánu je symetrie, kterou splňuje (rotační invariance, invariance vůči otočení času apod.). Pak sekvence následujících hladin energií se stejným spinem a paritou bude mít stejné statistické vlastnosti jako spektrum náhodných matic, jehož prvky jsou nezávislá čísla získaná z Gaussovské normální distribuce. Hladiny různých spinů a parit nejsou korelované.⁶

6 Jak tento překlad tak překlad Bogilhasovy domněnky jsem psal sám.

Netrvalo dlouho než Wigner vyvodil tvar NNSD 2 x 2 matic invariantních vůči rotacím a inverzi času (soubor GOE – symetrické matice).

$$p_w(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4}s^2} \quad (1.12)$$

Distribuce (2.10) se v kontextu kvantového chaosu nazývá Wignerova distribuce⁷. Můžeme zde vidět, že pokud máme NNSD rozložené podle (1.12), tak ve studované veličině můžeme pozorovat „odpuzování“, jelikož (1.12) nemá maximum v nule narozdíl od Poissonovy distribuce (1.9).

Nakonec ještě v této kapitole zmíním Bohigasovu domněnku, která popisuje spojitosti mezi klasickým a kvantovým chaosem v systémech, které mohou řešit jak klasicky tak kvantově.

Teorém 2: Bohigasova domněnka^[6]:

All quantum systems whose classical analogues are chaotic exhibit the same spectral fluctuation properties as predicted by the theory of random matrices. On the contrary, quantum systems whose classical analogues are stable (not necessarily integrable) have uncorrelated energy levels

Všechny kvantové systémy, jejichž klasické analogie jsou chaotické, vykazují stejné vlastnosti oscilací, které předvídá teorie náhodných matic. Na druhou stranu, kvantové systémy, jejichž klasické analogie jsou stabilní (ne nutně integrabilní), mají nekorelované hladiny energie.

Tvrzení nebylo obecně dokázáno a už se podařilo najít protipříklad pro každý směr implikace tvrzení. Proti příklady tohoto tvrzení jsou však v menšině vůči případům, které ho potvrzují. A tak i když nemůžeme prohlásit ekvivalenci mezi klasickým a kvantovým chaosem, tam kde jdou studovat obě 2 veličiny, tak se ukázalo, že kvantový chaos s klasickým chaosem velmi dobře koreluje.

7 Neplést s Wignerovou funkcí v kvantové mechanice, která se také často nazývá Wignerova distribuce.

1.2.4 Brodyho funkce

Pro stanovení, zda je systém chaotický nebo ne se díváme na rozdělení NNS jak jsem psal výše. Pokud NNSD má tvar Poissonovy distribuce (1.9), tak systém prohlásíme za klasický a pokud rozdělení odpovídá Wignerově distribuci (1.12) tak ho nazveme chaotický (Pro systémy s symetrií časové inverze). T. A. Brody^[7] zavedl rozdělení, které v závislosti na 1 parametru ω ($0 \leq \omega \leq 1$) přechází mezi Poissonovou a Wignerovou distribucí. Brodyho distribuce má tvar:

$$P_B(x, \omega) = (\omega + 1) N_\omega s^\omega e^{-N_\omega s^{\omega+1}} \quad (1.13)$$

$$N_\omega \equiv \left[\Gamma\left(\frac{\omega+2}{\omega+1}\right) \right]^{\omega+1}$$

Pro $\omega = 0$ je Brodyho distribuce rovna Poissonově (1.9) a pro $\omega = 1$ je rovna Wignerově distribuci pro GOE (1.12). Fit touto distribucí nám umožní kvantifikovat, zda se systém chová chaoticky nebo klasicky. Nabízí se používat parametr ω (dále v textu mu budu říkat Brodyho parametr) jako kvantifikátor chaosu a aplikovat toto rozdělení pro mixované systémy. V následující kapitole se budu zabývat statistickými metodami pro fitování funkcí a stanovení kvality tohoto fitu.

1.3 Kvantový chaos v experimentech

Kvantový chaos není pouze teoretická závislost. Například při studiu Fano-Feshbachových rezonancí molekul dysprosia a erbia^{[8][9][10]} bylo nalezeno kvantově chaotické chování v distribuci rezonancí. V pracích [8] a [9] je detailně popsáno jakým způsobem bylo obdrženo spektrum Fano-Feshbachových rezonancí. Práce [9] a [10] pak rozebírají chaotické chování NNSD výše zmíněného spektra.

Na konci své práce budu kvantifikovat míru chaosu na základě Brodyho parametru pro data poskytnutá paní doktorkou Augustovičovou teoretického spektra molekul dysprosia za nulového magnetického pole.

2 Matematické metody použité v práci

V této části práce se budu zabývat matematickými (a statistickými) metodami použitými pro generování dat a jejich testování. Představím základní pojmy ze statistiky a postupy pro fitování funkcí, které později využiji pro stanovení chaotičnosti jak simulovaných, tak reálných kvantových systémů. Nakonec předvedu testovací sady dat pro kontrolu fitu Brodyho funkce a porovnáám kvalitu fitu mixovaného setu generovaného podle Brodyho funkce s Brodyho parametrem mezi 0 a 1, a setu, který vznikne jako součet klasické sady dat a chaotické sady dat.

2.1 Pravděpodobnost na spojitě sadě dat

Hustota pravděpodobnosti

Nejprve je nutné zadefinovat pojem **hustota pravděpodobnosti**^[11], který nám umožní pracovat se spojitou sadou dat. Klasická představa pravděpodobnosti připisuje hodnoty jednotlivým diskrétním stavům⁸ podle toho, jaká je šance že se realizují. Pokud pracujeme se spojitou sadou dat, jako například čas nebo vzdálenost, nemůžeme rozdělit situaci na konečnou sadu stavů. Místo připisování pravděpodobnosti konkrétním situacím budu připisovat pravděpodobnost podmnožinám s nenulovou mírou množiny všech možných stavů. (Například pokud měřím dolet hozeného míče tak nemá smysl se ptát jaká je šance že míč dopadne do vzdálenosti přesně 5,0000 ... metru místo toho pokládám otázky jako jaká je šance, že míč dopadne do vzdálenosti mezi 3 a 6 metry).

Zavádí se místo pravděpodobnosti, **hustota pravděpodobnosti** $p(x)$ ⁹, co je funkce taková, že pravděpodobnost $P([a,b])$ toho, že naměříme stav na intervalu $[a,b]$,¹⁰ je daná plochou pro křivkou $p(x)$ na intervalu $[a,b]$, kterou spočítáme integrálem funkce $p(x)$ přes interval $[a,b]$ ^[11]

$$P([a, b]) = \int_a^b p(x) dx \quad (2.1)$$

Pokud uděláme integrál přes všechny možné stavy, tak dostaneme pravděpodobnost 1, což je normovací podmínka pro definici funkce hustoty pravděpodobnosti.^[11]

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx \quad (2.2)$$

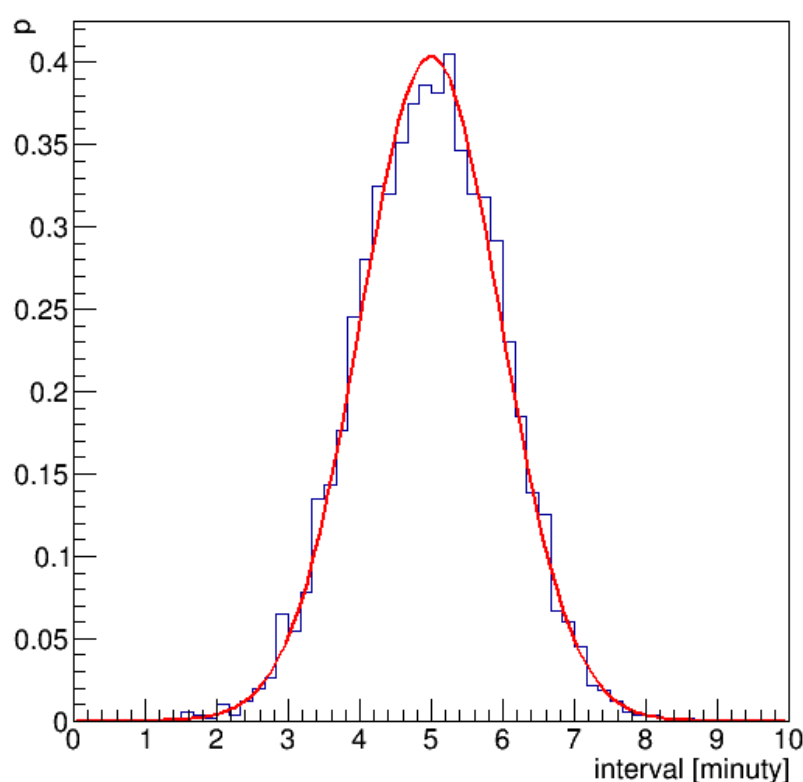
8 Termínem stav myslím konkrétní možnost (realizaci, situaci), která může nastat v případě hodu kostkou. Stavem myslím možné hodnoty na kostce 1,2,3,4,5,6. V spojitěm případě, například hod míčem stavem myslím konkrétní bod na metru naměřené vzdálenosti do které míč doletěl.

9 X je zde stav jako výše. Integrálem pak rozumím Lebesgueův integrál.

10 Není nutné se bavit pouze o intervalu na reálných číslech můžeme stejnou konstrukci provést na libovolné měřitelné množině a přiřazovat pravděpodobnosti jejím měřitelným podmnožinám. Zde uvádím ten nejjednodušší příklad jelikož v práci pracujeme pouze s spojitými funkcemi 1 proměnné.

Z těchto dat nedostaneme pravděpodobnost jednoho konkrétního stavu, protože ta bude nulová, ale můžeme zkoumat pravděpodobnosti intervalů kolem libovolné hodnoty. Velikost těchto intervalů pak volíme podle požadované přesnosti.

Příkladem spojitě sady dat může být třeba následující situace. Vezmu si do ruky stopky a dám si za úkol stopnout přesně 5 minut. Tato situace se dá modelovat Gaussovým rozdělením, kdy většina pokusů bude kolem správné hodnoty 5 minut, ale bude tu dost velká šance se odchýlit. Větší odchylky budou mít menší pravděpodobnost. Kdybych si následně rozdělil čas na 10 sekundové intervaly a zaznamenával svoje pokusy, tak výsledná pravděpodobnost bude jako na obrázku 2. Hodnoty v histogramu jsou normované, aby celková plocha byla rovna 1, což dostaneme jednoduše tím, že celkový počet pokusů v daném intervalu vydělím celkovým počtem pokusů.



Obrázek 2: Červeně hustota pravděpodobnosti času na stopkách.
Modře naměřené časy v 10 sec intervalech

Kromě spojitých množin můžeme hustotu pravděpodobnosti připisovat i diskrétním stavům v podobě Diracovy delta funkce. Můžeme pak popisovat i stavy, které vzniknou jako kombinace diskrétních a spojitých stavů. Jako hustota pravděpodobnosti může sloužit libovolná funkce taková, pro kterou rovnice (2.2) dává smysl a platí.

Příkladem situace, kdy musíme použít nespojitou hustotu pravděpodobnosti může být například pokus se stopkami jako výše s tím rozdílem, že stopky jsou porouchané a při 1 ze 3 měření ukáží hodnotu 0. Hustota pravděpodobnosti by pak byla popsána dvěma třetinami stejné Gaussovy distribuce + jednou třetinou Diracovy delta funkce v bodě 0.

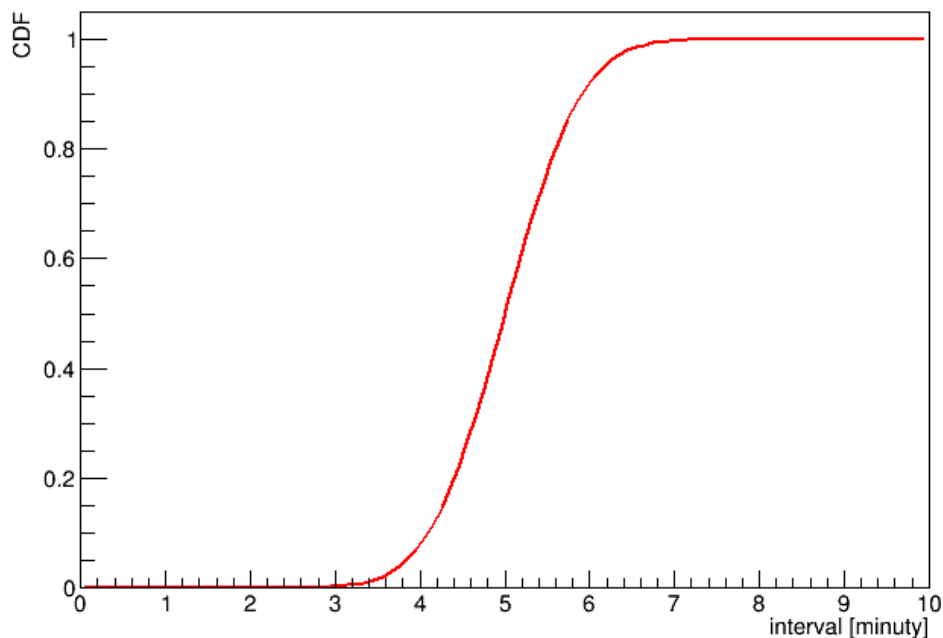
Kumulativní distribuční funkce (CDF)

Jednou z často kladených otázek při práci s daty je otázka, jaká bude pravděpodobnost, že naměříme stav s menší/větší hodnotou než je daná hodnota. Dosazením do vzorce (2.1) interval $[-\infty, t]$ dostaneme **kumulativní distribuční funkci** $F(t)$.^[11] Budu používat zkratku CDF od anglického cumulative distribution function.

$$F(x) = \int_{-\infty}^x p(t) dt \quad (2.3)$$

Můžeme aplikovat na výše zmíněný příklad a spočítat CDF z hustoty pravděpodobnosti pro intervaly příjezdů vlaků. Výsledek uvádím na obrázku níže. CDF Gaussovy distribuce se nazývá chybová funkce.

CDF Gaussovy distribuce



Obrázek 3: Kumulativní distribuční funkce z Gaussovy distribuce s parametry jako na obrázek 2

CDF je neklesající funkce od 0 do 1 a její derivací dostaneme zase hustotu pravděpodobnosti. Experimentálně je jednodušší určit CDF než hustotu pravděpodobnosti a pak jí derivovat pro další statistické studium pozorovaného jevu. V této práci se CDF využívá pro generaci pseudonáhodných čísel.

2.2 Generování pseudonáhodné sady dat

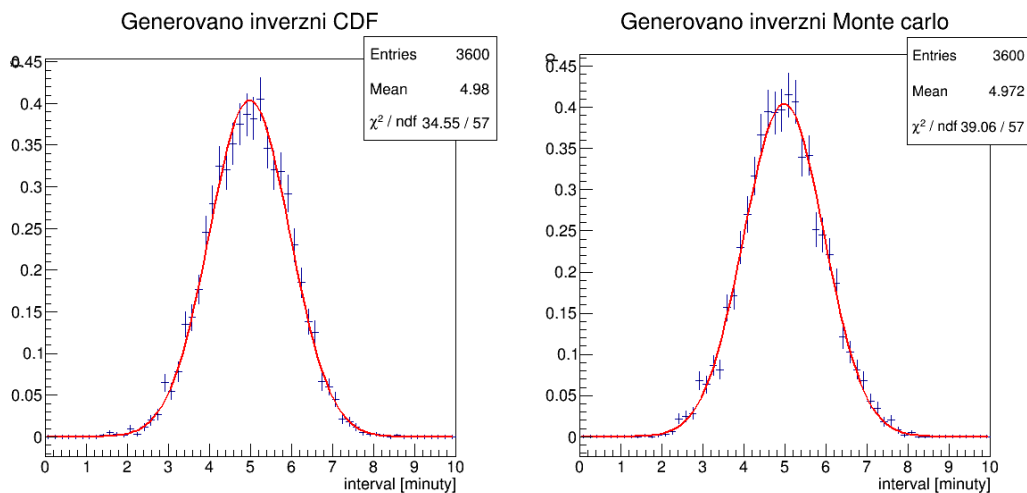
Počítače můžou jednoduše generovat náhodné čísla rovnoměrně rozdělená. Pokud chceme generovat náhodná čísla podle nějaké jiné distribuce, tak můžeme využít následující algoritmy, které převedou čísla generovaná uniformně na čísla rozházená podle dané distribuce.

Generování pseudonáhodných dat pomocí inverze CDF

Pokud jsem schopen spočítat CDF mé hledané distribuce, tak mám možnost jednoduše generovat náhodná čísla s danou distribucí. Stačí vygenerovat náhodné číslo podle uniformní distribuce z intervalu $[0,1]$. Pak toto číslo dosadím do inverze CDF $F^{-1}(x)$ a takto generovaná čísla jsou rozdělená pomocí hledané distribuce. Takto si můžeme na-generovat libovolný počet dat s cílenou distribucí.

Generování pseudonáhodných dat pomocí metody Monte Carlo (Rejekční metoda)

Pokud není možné získat CDF požadované hustoty pravděpodobnosti p . Tak můžeme pro generaci pseudonáhodných dat použít metodu Monte Carlo. Pro provedení metody Monte Carlo vygeneruji náhodné hodnoty (podle rovnoměrného rozdělení), X a Y . Hodnota X je z intervalu stejného intervalu jako požadovaný výsledný histogram. Hodnota Y je na intervalu od 0 do maxima hustoty pravděpodobnosti p . Potom co takovou dvojici vygeneruji, tak hodnotu X do statistiky zařadím, pokud platí $Y < p(X)$. Pokud podmínka není splněna, tak dvojici zahodím a vygeneruji další. Takto generované hodnoty vznikají pseudonáhodně s hustotou pravděpodobnosti p .



Obrázek 4: Porovnání Metody inverzni CDF s metodou Monte Carlo podle Gaussovy funkce s středem v bodě 5 a normované tak aby plocha pod grafem byla rovná 1. Fit byl proveden Gaussovou funkcí. Entries udává počet vstupů, Mean polohu středu a χ^2 / ndf je parametr který udává kvalitu fitu. Význam χ^2 a ndf definují v následující kapitole 2.3.

2.3 Fitování funkcí metodou χ^2

Hodnota χ^2 je hodnota, která určuje kvalitu fitu tím, že se dívá na kvadráty odchylek od funkce $f(x)$, kterou fitují daný histogram a daty v histogramu. Hodnotu χ^2 dostaneme sumou přes kvadráty rozdílu naměřené hodnoty a předpokládané hodnoty.^[12]

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(E_i - O_i)^2}{\sigma^2} \quad (2.4)$$

Kde i je index, který čísluje naměřené hodnoty a odpovídá bodům v x_i na grafu. E_i jsou očekávané hodnoty dané funkcí $f(x)$ tak, že $E_i = f(x_i)$. Pak O_i je naměřená hodnota. Značení E a O volím podle anglického Expected a Observed. Nakonec σ je směrodatná odchylka, hodnota σ^2 se nazývá rozptyl pokud nemám data pro zavedení směrodatné odchylky, tak standardně volím odmocninu z očekávané hodnoty v daném bodě histogramu.

Další důležitou hodnotou je redukované χ^2 , kterou dostaneme vydělením χ^2 počtem stupňů volnosti funkce ndf (Number of Degrees of Freedom), což je počet nezávislých informací ve fitované sadě dat. Standardně dostanu $ndf = N - p$, kde N je počet hodnot v histogramu a p je počet parametru funkce $f(x)$.

$$\chi_{red}^2 = \frac{\chi^2}{ndf} \sim 1 \quad (2.5)$$

Pokud je hodnota χ_{red}^2 podstatně větší než 1, tak to naznačuje, že fit není dobrý a je důležité zvážit zda fitujeme správnou funkci. Pokud χ_{red}^2 je výrazně menší než 1, tak to naznačuje tomu, že jsme „přefitovali“ histogram, co znamená, že bychom měli hledat funkci, kdy budeme fitovat pomocí méně volných parametrů.

Fitování pomocí minimalizace χ^2 nám pak umožňuje najít parametry známé funkce, které nejlépe fitují náš histogram. Fitovací algoritmy pracují s výchozím odhadem parametrů od uživatele, z kterých vypočítá χ^2 podle funkce (2.4). Tato funkce se pak posle do minimalizeru, co je program, který numericky hledá minimum funkce.

Metoda minimalizace χ^2 může narazit na problém, pokud odhad na vstupu je příliš mimo, což může prodloužit čas výpočtu nebo dojít ke špatnému výsledku. V rámci optimalizace se často volí hranice kolem původního odhadu, takto může špatný původní odhad vést na naprosto nepoužitelný fit.

V zbytku práce budu používat fitovací nástroj v programu <https://root.cern/> . Konkrétně Pearsonovu χ^2 metodu^[12].

2.4 Test Fitovacího nástroje pro Brodyho funkci

V této části předvedu aplikaci výše uvedené metody na data generovaná pseudonáhodně podle Brodyho funkce, čím ověřím fungování fitovacího programu na kontrolních datech. Dále můžu porovnat kvalitu fitu pro různě velké sady dat a pro různé hodnoty ω . Připomenu tvar Brodyho distribuce.

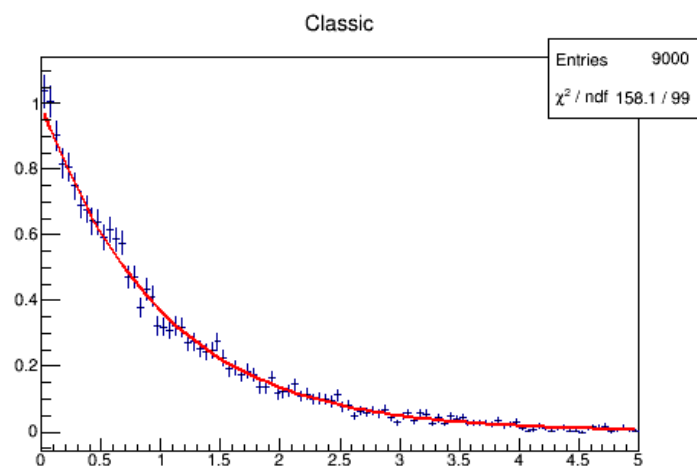
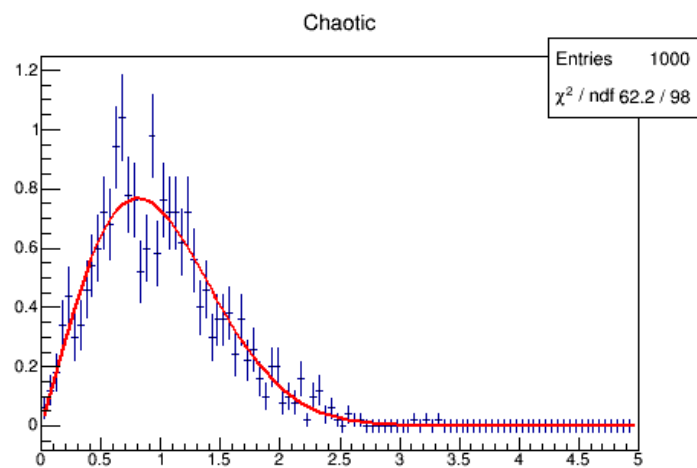
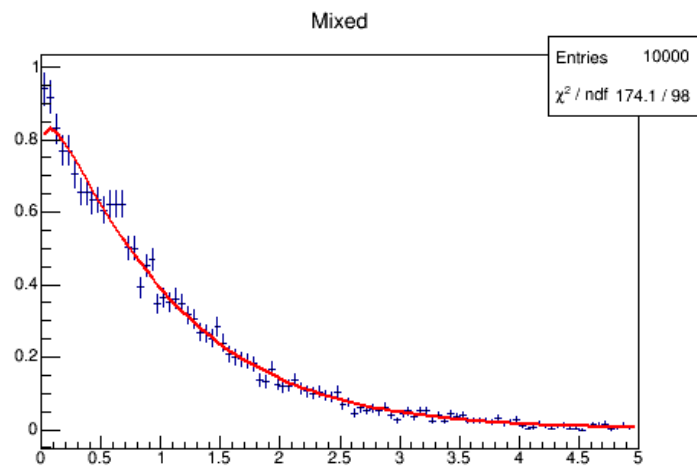
$$P_B(x, \omega) = (\omega + 1) N_\omega s^\omega e^{-N_\omega s^{\omega+1}} \quad (2.5)$$
$$N_\omega \equiv \left[\Gamma\left(\frac{\omega+2}{\omega+1}\right) \right]^{(\omega+1)}$$

Mixované sety generované jako součet klasických a chaotických.

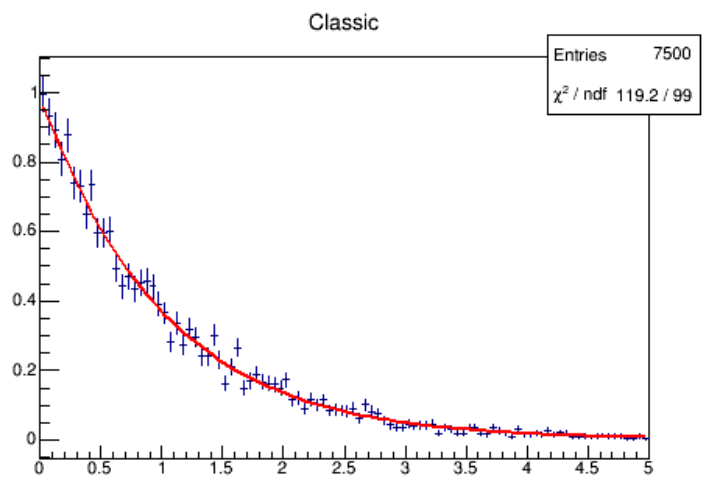
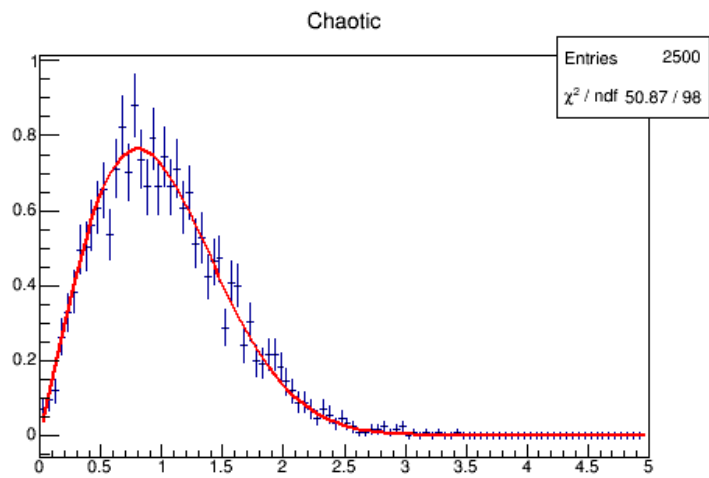
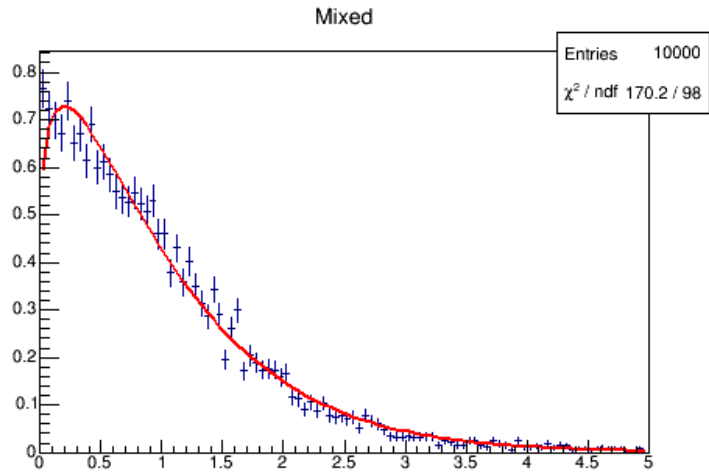
Kromě sad dat, které generují přímo z Brodyho distribuce, můžu také generovat data jako součet klasické sady dat s chaotickou sadou dat a pozorovat, jak vychází Brodyho parametr a jak fit odpovídá takto mixovaným sadám dat.

Na následujících stránkách budu uvádět porovnání NNS mixovaných dat vzniklých z různých poměrů chaotických ku regulárním 1:9 na obrázku 5.1, 1:3 na obrázku 5.2, 1:1 na obrázku 5.3, 3:1 na obrázku 5.4 a 9:1 na obrázku 5.5. Horní histogram zobrazuje mixovaný soubor který vznikl součtem chaotického histogramu (uprostřed) a klasického histogramu (dole). V tabulce u histogramů uvádím počet vstupů, χ^2 s počtem stupňů volnosti a hodnotu Brodyho parametru s chybou.

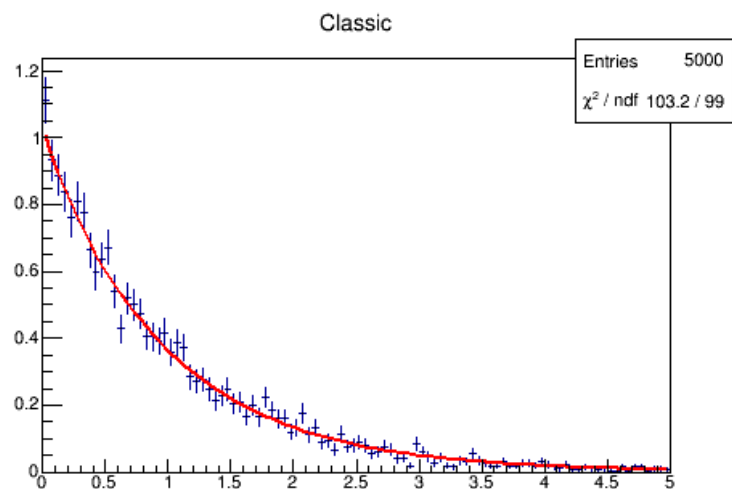
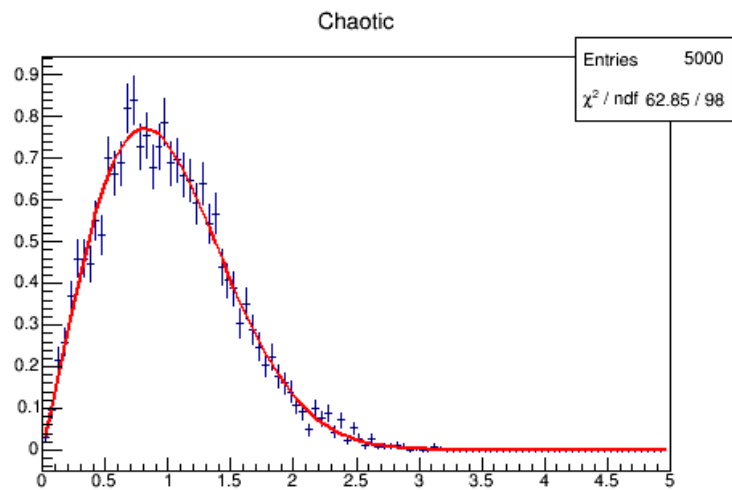
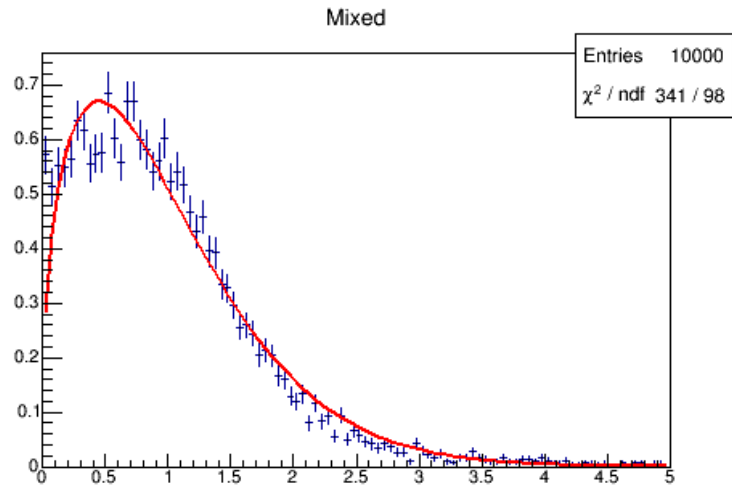
Brodyho parametr pro data generovaná pro čistě chaotický set uvádím s asymetrickou chybou, protože Brodyho funkce je málo citlivá na Brodyho parametru pro vysoké hodnoty Brodyho parametru. Na funkci uvádím limit, který drží parametr na intervalu $[0, 1]$. Při fitování dat, které se velmi dobře blíží Wignerově distribuci dostávám hodnotu Brodyho parametru $\omega > 1$. V výsledcích budu v takovém případě uvádět Brodyho parametr v formátu $\omega = 1_{-\sigma}^{+\delta}$, kde $\omega = 1$, δ je kladná chyba a σ je záporná chyba.



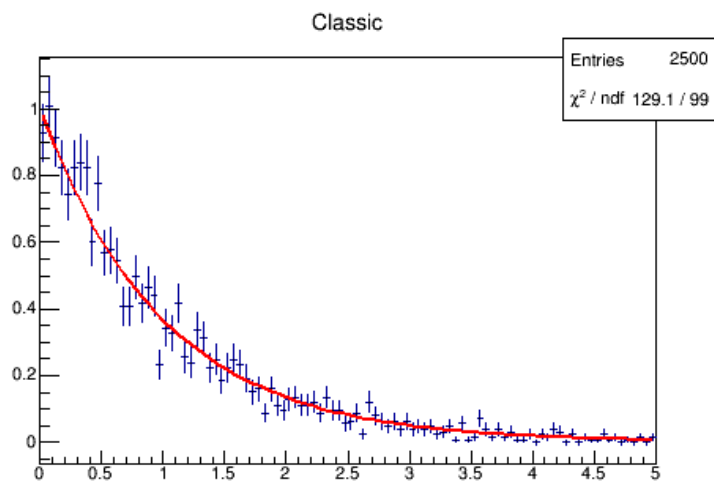
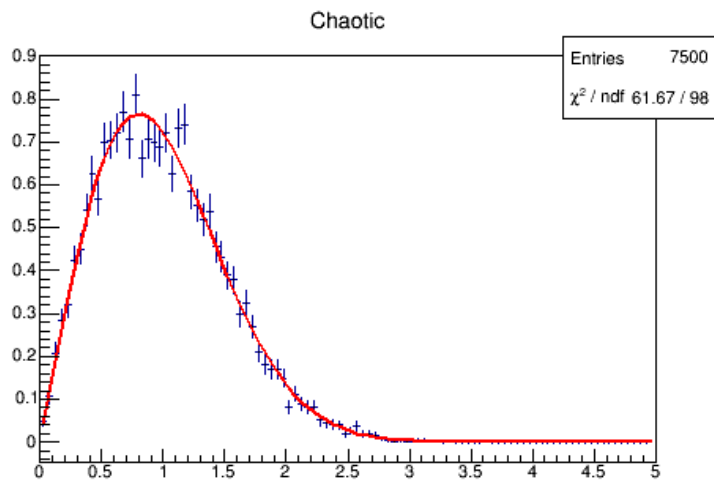
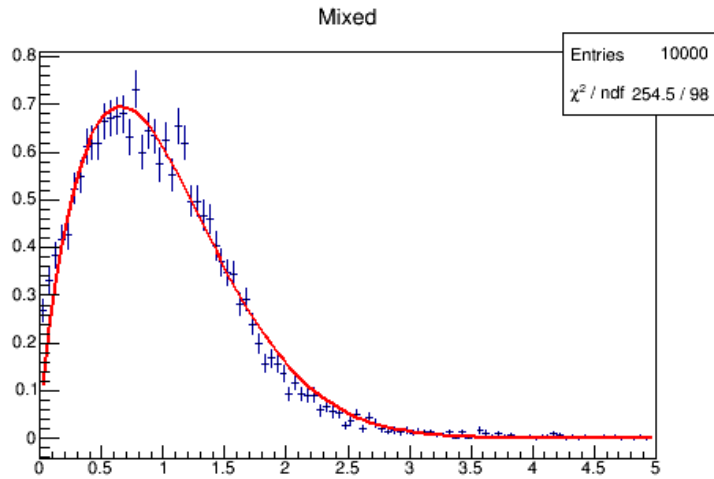
Obrázek 5.1 Mixovaný set pro poměr 1:9 chaotické ku klasické data (dole). Brodyho parametr vyšel pro: Mixované $\omega = 0.06 \pm 0.01$ chaotické $\omega = 1.00_{-0}^{+0.04}$ a klasické $\omega = 0.00 \pm 0.01$.



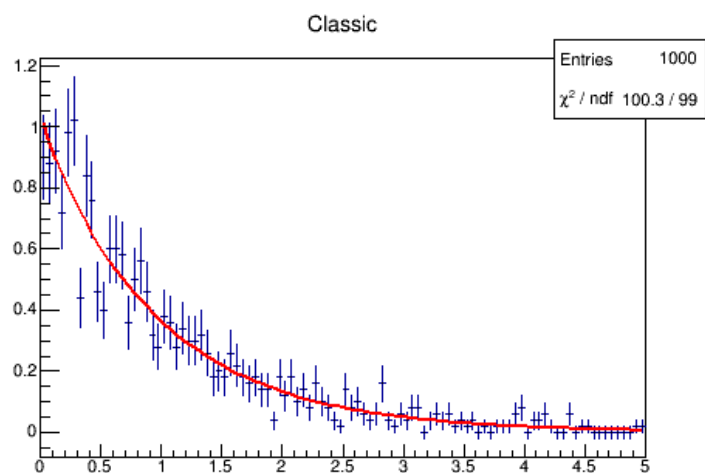
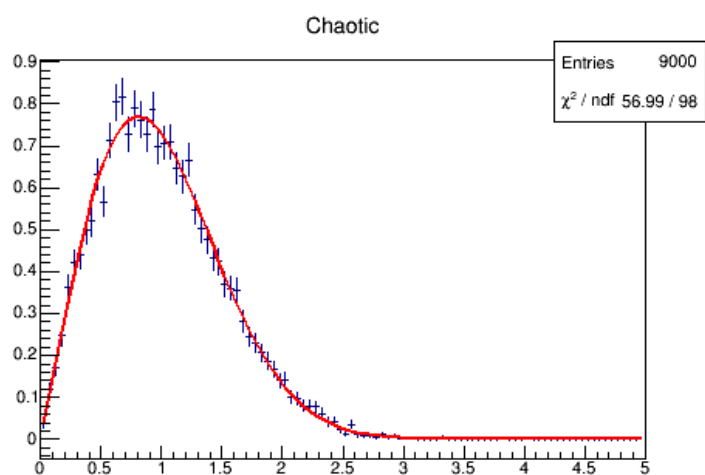
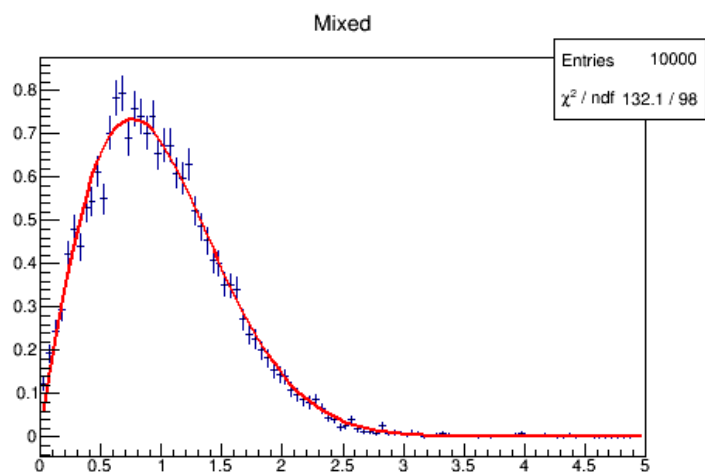
Obrázek 5.2 Mixovaný set pro poměr 1:3 chaotické ku klasickým. Mixované data (nahore), chaotické data (uprostřed) a klasická data (dole). Brodyho parametr vyšel pro: Mixované $\omega = 0.16 \pm 0.01$ chaotické $\omega = 1.00_{-0}^{+0.08}$ a klasické $\omega = 0.00 \pm 0.01$.



Obrázek 5.3 Mixovaný set pro poměr 1:1 chaotické ku klasickým. Mixované data (nahore), chaotické data (uprostřed) a klasická data (dole). Brodyho parametr vyšel pro: Mixované $\omega = 0.40 \pm 0.01$ chaotické $\omega = 1.00_{-0}^{+0.07}$ a klasické $\omega = 0.00 \pm 0.01$.



Obrázek 5.4 Mixovaný set pro poměr 3:1 chaotické ku klasickým. Mixované data (nahore), chaotické data (uprostřed) a klasická data (dole). Brodyho parametr vyšel pro: Mixované $\omega = 0.68 \pm 0.02$ chaotické $\omega = 1.00_{-0}^{+0.04}$ a klasické $\omega = 0.00 \pm 0.02$.



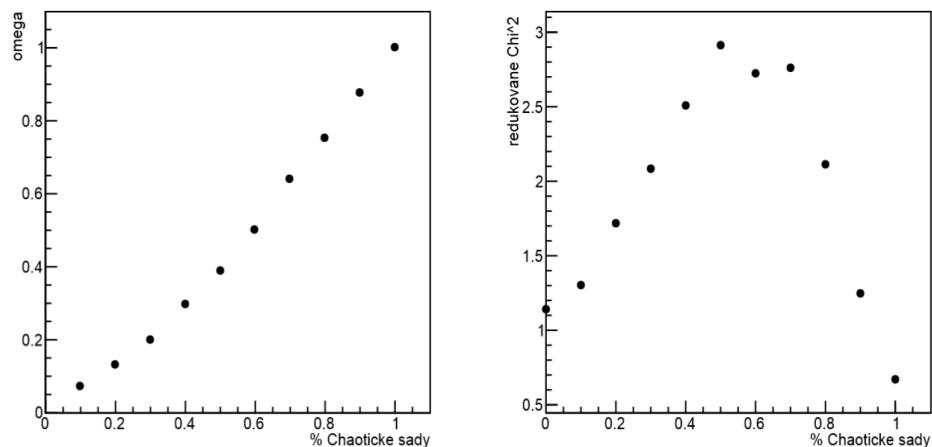
Obrázek 5.5 Mixovaný set pro poměr 9:1 chaotické ku klasickým. Mixované data (nahore), chaotické data (uprostřed) a klasická data (dole). Brodyho parametr vyšel pro: Mixované $\omega = 0.89 \pm 0.02$ chaotické $\omega = 1.00_{-0}^{+0.06}$ a klasické $\omega = 0.00 \pm 0.03$.

Pro sady generované podle Brodyho funkce dostáváme redukované χ^2 velmi blízké k 1, jak v klasickém případě tak v chaotickém. Hodnoty χ^2 jsou zde menší než 1 co napovídá tomu, že dochází k přefitování a v těchto případech bychom si vystačili s Poissonovou nebo Wignerovou distribucí.

V mixovaných případech nabývá Brodyho parametr hodnot mezi 0 a 1 a je zde vidět korelace mezi poměrem velikosti chaotického setu ku velikosti klasického a Brodyho parametrem. Díky této korelaci můžeme vidět, že Brodyho parametr lze použít jako kvantifikátor chaosu nejen v extrémních případech (úplně chaotický systém, úplně regulární systém), ale i v mixovaných systémech.

Můžeme si všimnout, že díky volbě chyby binu jako odmocnina z hodnoty v binu dostáváme redukované χ^2 nezávislé na počtu hodnot v histogramu. Pro méně hodnot v histogramu dostáváme po normování větší chyby.

Nejhorší fit dostáváme pro mixovaný set s procentem chaotického setu kolem 50%. Zde byla hodnota redukovaného χ^2 velmi dobře rovna 3. Podle očekávání dostáváme lepší fit pro data, která jsou velmi blízké nemixovaným datům.



Obrázek 6: Závislost Brodyho parametru a redukovaného χ^2 na % v chaotických dat v mixované sadě. Data pro každý bod jsou brána z statistiky pro 10 opakování

Obrázek 6 zobrazuje výše zmíněnou závislost hodnoty parametru omega a redukovaného χ^2 na % chaotické sady v mixované sadě. Vidíme, že Brodyho parametr se dá použít k kvantifikaci chaosu, a že kvalita fitu je nejmenší pro nejvíce mixované sady.

3 Teorie náhodných matic

3.1 Soubory Gaussovsky náhodných matic (GOE, GUE, GSE)

Jak jsem psal v úvodu o kvantovém chaosu, tak spektrální korelace, které vypovídají o chaotickém chování, můžeme pozorovat i na vlastních číslech náhodných matic z souborů GOE, GUE, GSE. V této práci se budeme zabývat převážně souborem GOE, který odpovídá systémům s symetrií časové inverze.

Zavedu termín **hustoty hladin spektra** systému. **Hladinou systému** myslím v reálném případě naměřené hodnoty pozorovatelné veličiny a v případě náhodné matice vlastní čísla. Hladiny budu značit E . Hustota hladin spektra $\rho(E)$ je funkce, kterou zavádím jako analogicky k hustotě pravděpodobnosti jako v kapitole 2.1. Integrováním $\rho(E)$ přes interval I dostanu počet naměřených hladin v daném intervalu I . Normováním $\rho(E)$ na celé množině na 1 dostanu z $\rho(E)$ hustotu pravděpodobnosti naměření hladiny E .

Matice GOE, GUE, GSE se nazývají Gaussovské protože prvky matic jsou generované pseudonáhodně podle Gaussovy funkce. Písmena O, U, S v GOE, GUE, GSE pojmenovávají operace které zachovávají hustotu hladin. Mějme transformaci W , náhodnou matici G a $G' = W(G)$.

GOE Gaussovský Ortogonální Soubor (Gaussian Orthogonal Ensemble)^[13]

Matice z souboru GOE jsou invariantní vůči ortogonálním transformacím. Kde G je matice ze GOE a O je ortogonální matice.

$$\rho_G(E) = \rho_{G'}(E) \quad \text{kde} \quad G' = O^{-1} G O \quad (3.1)$$

Matice souboru GOE simulují systémy s symetrií časové inverze. Matice z souboru GOE jsou reálné symetrické Gaussovské náhodné matice s $N(N+1)/2$ nezávislými prvky.

Pokud na spektru souboru GOE provedeme NNS dostaneme Wigner-Dysonovu distribuci ve tvaru:

$$p_W^{\beta=1}(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2} \quad (3.2)$$

GUE Gaussovský Unitární Soubor (Gaussian Unitary Ensemble)^[13]

Matice z souboru GUE jsou invariantní vůči unitárním transformacím. Kde G je matice z GUE a U je unitární matice.

$$\rho_G(E) = \rho_{G'}(E) \quad \text{kde} \quad G' = U^{-1} G U \quad (3.3)$$

Matice s souboru GUE simulují systémy bez symetrie časové inverze. Matice z souboru GUE jsou komplexní hermitovské Gaussovské náhodné matice s N^2 nezávislými prvky.

Pokud na spektru souboru GUE provedeme NNS dostaneme Wigner-Dysonovu distribuci ve tvaru:

$$p_W^{\beta=2}(s) = \frac{32}{\pi^2} s^2 e^{-\frac{4}{\pi} s^2} \quad (3.4)$$

GSE Gaussovský Symplektický Soubor (Gaussian Symplectic Ensemble)^[13]

Matice z souboru GSE jsou invariantní vůči symplektickým transformacím. Kde G je matice z GSE a S je symplektická matice.

$$\rho_G(E) = \rho_{G'}(E) \quad \text{kde} \quad G' = S^{-1} G S \quad (3.5)$$

Matice s souboru GSE odpovídají nejméně častému případu, který nastává převážně pro systémy s poločíselným spinem. Matice z GSE jsou opět Gaussovsky generované a s prvky, které popíšeme kvaterniony a matice je samosdružená.

Pokud na spektru souboru GSE provedeme NNS dostaneme Wigner-Dysonovu distribuci ve tvaru:

$$p_W^{\beta=4}(s) = \left(\frac{64}{9\pi}\right)^3 s^4 e^{-\frac{64}{9\pi}s^2} \quad (3.6)$$

Parametr β se nazývá Dysonovo číslo, které mi indexuje jednotlivé soubory. Vyšší Dysonovo číslo značí silnější repulzi ve spektru. V limitě $s \ll 1$ platí:

$$p(s)_W^\beta \approx s^\beta \quad (3.7)$$

3.2 Generování GOE matice

Pro generaci GOE matice využijeme vlastnosti zmiňované v minulé kapitole. Stačí získat reálnou symetrickou matici s prvky, které generujeme pomocí normální distribuce. Matici G z souboru GOE dimenze N získáme jednoduše vygenerováním N^2 prvků pomocí normálního rozdělení s středem v 0 a disperzí 1, z kterých vytvořím matici R dimenze N . Prvky matic R a G značíme R_j^i a G_j^i . Symetrizaci provedu:

$$G_j^i = \frac{1}{2}(R_j^i + R_i^j) \quad (3.8)$$

Matice G pak bude z souboru GOE a bude splňovat vlastnosti, které od GOE matic požadujeme.

Hustota hladin spektra matice G pak bude mít tvar podle Wignerova půlkruhového zákona^[4], kdy pravděpodobnost nalezení hladiny (hustota hladin normovaná, tak aby její integrál byl roven 1) bude mít tvar půlkruhu^[13], který dostanu z předpisu:

$$\rho(E) = \frac{1}{R} \sqrt{1 - (E/R)^2} \quad (3.9)$$

Pro $0 < E/R < 1$ a $\rho(E) = 0$ pro ostatní E , kde R je poloměr půlkruhu.

Wigneruv půlkruhový zákon popisuje hladkou část hustoty hladin a platí i pro matice GUE a GSE.

3.3 Unfolding

Hustotu hladin $\rho(E)$ rozdělím na hladkou část $\rho_h(E)$ a na oscilující část $\rho_o(E)$.

$$\rho(E) = \rho_h(E) + \rho_o(E). \quad (3.10)$$

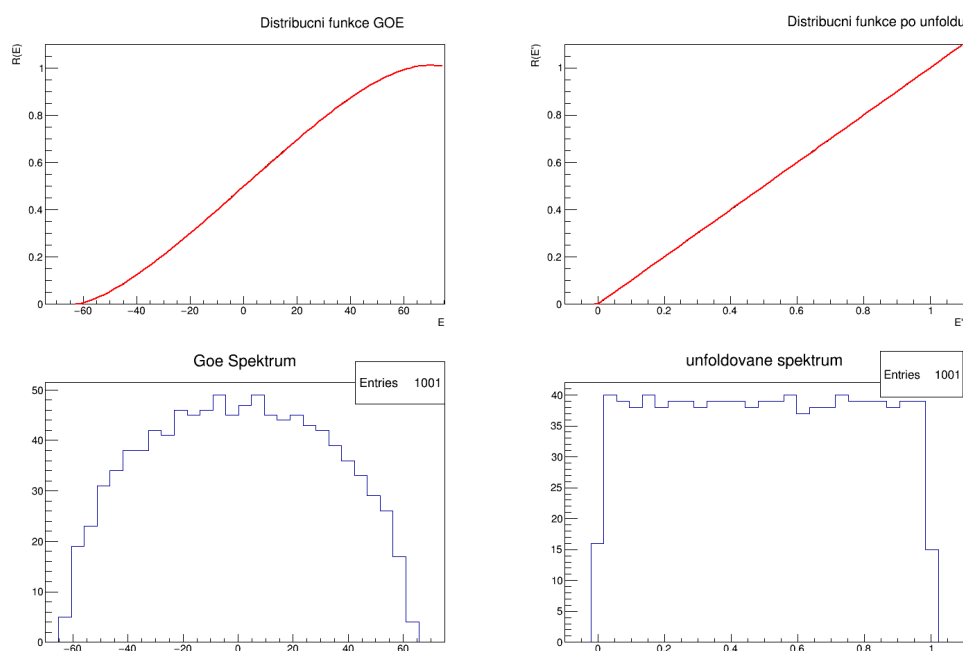
Hladká část $\rho_h(E)$ neobsahuje informaci o korelacích mezi jednotlivými hladinami^[2], a proto při práci s daty provádíme unfolding, což je metoda, která přemění hladkou část spektra na konstantní funkci.

Pro provedení unfoldingu musíme nejdříve zavést distribuční funkci $R(E)$, kterou pro diskrétní spektrum definujeme jako:

$$R(E) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{i=n} \theta(E - E_i) \quad (3.11)$$

Kde E_i je posloupnost naměřených hladin spektra, n je počet naměřených hladin a θ je Heavisidova funkce, která kladným číslům přiřadí 1 a nekladným přiřadí 0. Funkce R je chová stejně jako kumulativní distribuční funkce z kapitoly 2.1 a pro $n = \infty$ se definuje stejně.

Takto získanou $R(E)$ pak fitujeme buď polynomem nebo pokud z teorie známe tvar $R(E)$, tak příslušnou funkcí. V této práci pro unfolding budu používat polynom 5 řádu. Fit polynomem je běžný postup pro provedení unfoldingu^[2]. Funkci získanou z fitu $R(E)$ nazveme $f(E)$. Transformací $E'_i = f(E_i)$ dostáváme pak unfoldované spektrum E' .



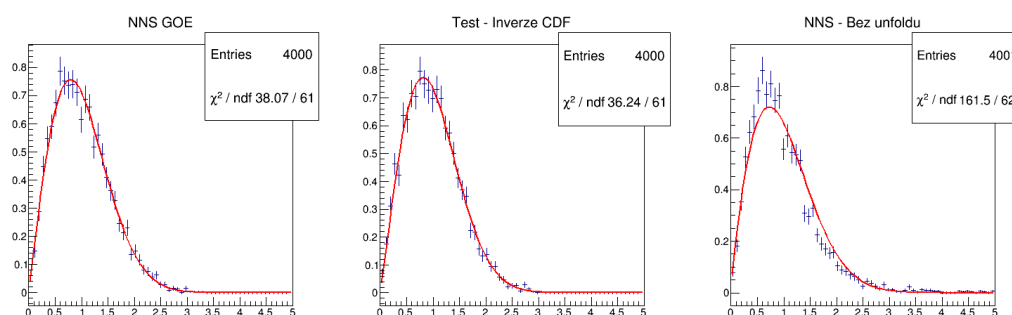
Obrázek 7: Porovnání distribučních funkcí (nahore) a hustot hladin (dole) pro GOE spektrum před unfoldem (v levo) a po unfoldu (v pravo). Pro matici $N = 1001$. Jde vidět unfolding narovnal hladkou část hustoty hladin na konstantní funkci. Oscilující část v hustotě hladin zůstala.

3.4 Generování chaotického setu z matice GOE

Ted' můžeme použít uvedené metody z teorie náhodných matic pro simulaci kvantového chaosu. Vygenerujeme matici z souboru GOE, získáme její spektrum a provedeme unfolding. Pak na unfolding viz obrázkem 7. Pro obě získané spektra provedu NNS a nafiluji Brodyho funkci a porovnam s daty, které jsem získal pseudonáhodnou generací.

Data, na kterých neproběhl unfolding, bylo nutné přeškálovat, aby hladiny energií byli na intervalu $[0,1]$ stejně jako unfoldovaná data. Škálování jsem provedl tím, že jsem NNS vydělil šířkou intervalu nosiče hustoty hladin.

NNS dat po unfoldingu/přeškálování jsem vynásobil počtem dat v spektru abych se zbavil závislosti NNSD na počtu dat. Unfolding zde data převedl na interval $[0,1]$ čím dostávám $1/N$ závislost na N , kde N je počet dat v sadě.



Obrázek 8 Srovnání NNS a fitu Brodyho funkci pro různé simulace kvantové chaotické sady dat. Unfoldovaného GOE setu (vlevo), pseudonáhodně generovaného (testovacího) setu a stejného setu bez unfoldingu. Hodnoty Brodyho parametru vycházejí jako: Unfoldovaný set $\omega = 0.99 \pm 0.02$ Testovací set $\omega = 1.00_{-0}^{+0.07}$ a Neunfoldovaný set $\omega = 0.83 \pm 0.02$.

Výsledky potvrzují předpokládaný tvar NNSD pro spektra matic souboru GOE, kdy fit velmi dobře odpovídá předpokládané Wignerově distribuci (1.12). Unfoldované spektrum se chová jak diktuje teorie. Dostáváme velmi dobrý fit pro Brodyho funkci redukované χ^2 mi konzistentně vychází kolem 1 stejně jako u pseudonáhodně generované testovací sady.

Pro data, kde neproběhl unfolding, jsem musel provést přeškálování, které mi normalizovalo velikost intervalu hladin spektra. Hodnota χ^2 zde není spolehlivá, protože je velmi citlivá na tom, jak dobře se mi podaří provést přeškálování. Při opakovaném spuštění programu pro různá N jsem dostával nekonzistentní hodnoty redukovaného χ^2 , kdy někdy dostanu stejně kvalitní fit jako s unfoldovaným spektrem nebo s testovacím spektrem.

Kromě toho se mi projevuje nerovnoměrnost hladké části tím, že dostávám malé peaky v NNS v bodech kolem 3 a 9, které vznikají z dat na koncích intervalu. Na většině intervalu je chyba NNS způsobená hladkou částí hustoty hladin zanedbatelná vůči hodnotám. Tato chyba v NNS roste na krajích intervalu, kdy kolem maxima a minima je dokonce několikanásobně větší než naměřené NNS.

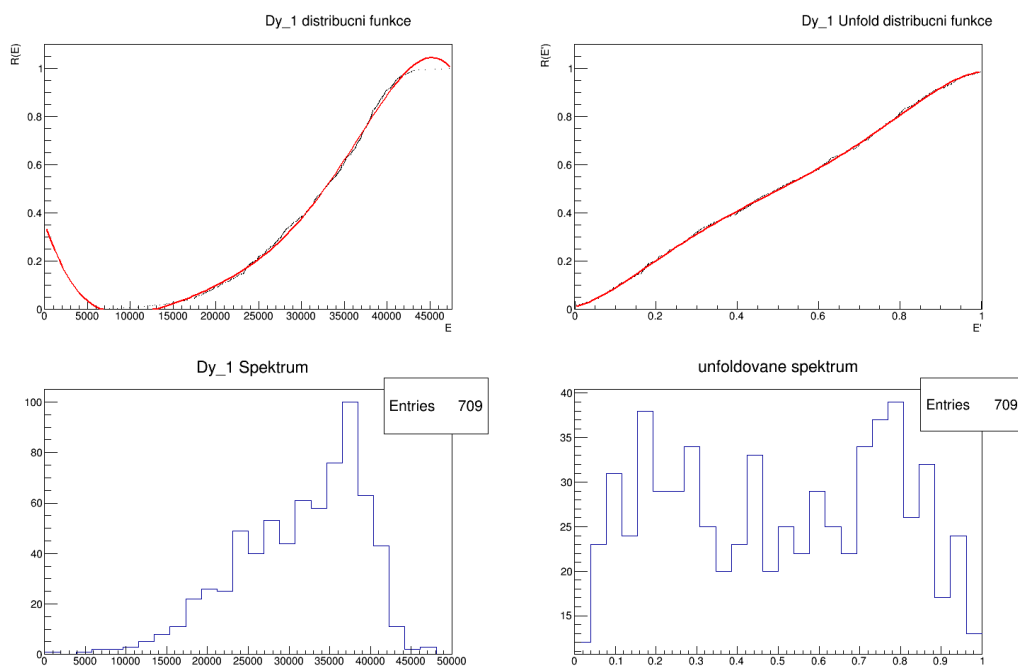
Potvrdil jsem nutnost unfoldingu pro provádění NNS. Unfolding data přeškáluje na správnou velikost a zbaví NNS závislosti na hladké části hustoty hladin.

4. Kvantifikace chaosu na reálných datech

Nyní aplikujeme stejné metody pro reálná data. Podívám se na data atomů dysprosia $\text{Dy}^{[14]}$ a na data molekul dysprosia $^{162}\text{Dy}_2^{[8]}$, které byly ochlazeny na extrémně nízké teploty, aby došlo k chaotickému chování.

4.1 Atomy Dy

V atomech Dy neočekáváme, že bychom našli chaotické chování. Provedu unfolding stejně jako pro simulovaná data.

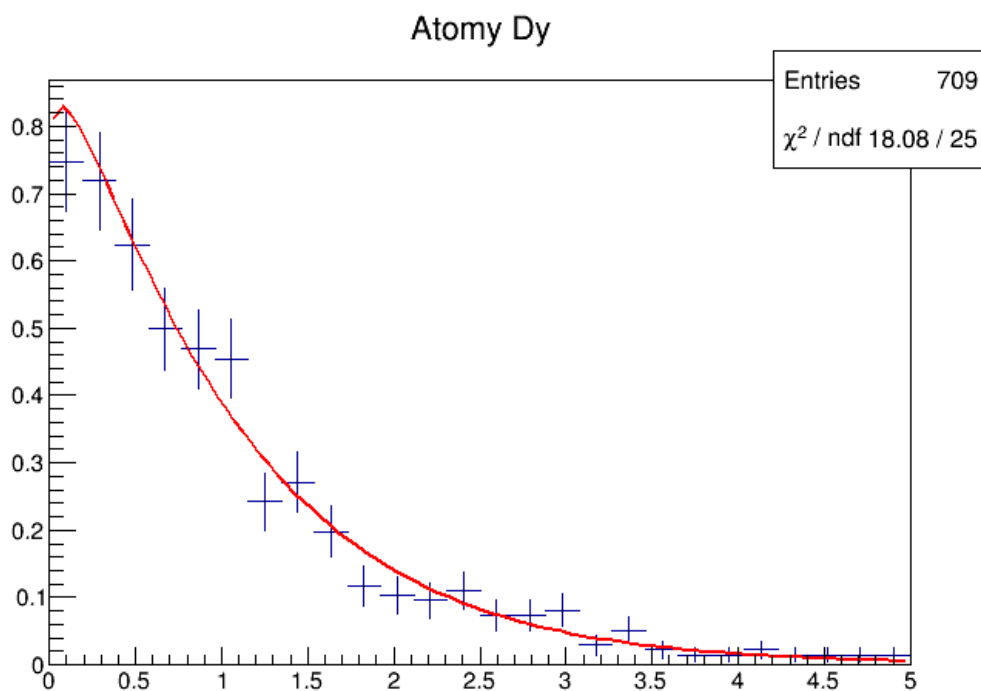


Obrázek 9 Porovnání distribučních funkcí (nahore) a hustot hladin (dole) pro Dy spektrum před unfoldem (v levo) a po unfoldu (v pravo). Data byla získána stránky NIST Atomic Spectra Database Levels Data^[14].

Z obrázku 9 je poznat, že reálná data jsou mnohem komplikovanější než simulace. Hlavní problém činí data na začátku a na konci. Specificky 0 – 5000 a 43000 – 50000 jsou části, kde nejsou skoro žádná data a na distribuční funkci můžeme vidět v těchto oblastech špatnou kvalitu fitu polynomem, co může vést k nekvalitní unfolding a na zbytek hladké části distribuce ve spektru.

V předešlé kapitole jsem diskutoval důležitost unfoldingu, kde už hladká část funkce přidá do dat závislost, která může zkreslit výsledky. I s nedokonalým unfoldingem dojde k naškálování dat na správnou velikost. Pokud se podíváme na distribuční funkci unfoldovaných dat, dostáváme velmi dobře přímku a na spektru unfoldovaných dat není vidět žádná hladká část.

Provedu standardně metodu NNS a fit Brodyho funkcí viz obrázek 10.



Obrázek 10 NNSD unfoldovaného spektra atomů dysprosia. Fit je dán Brodyho funkcí. Brodyho parametr vychází jako $0,06 \pm 0,04$. Redukované χ^2 vychází jako 0,72.

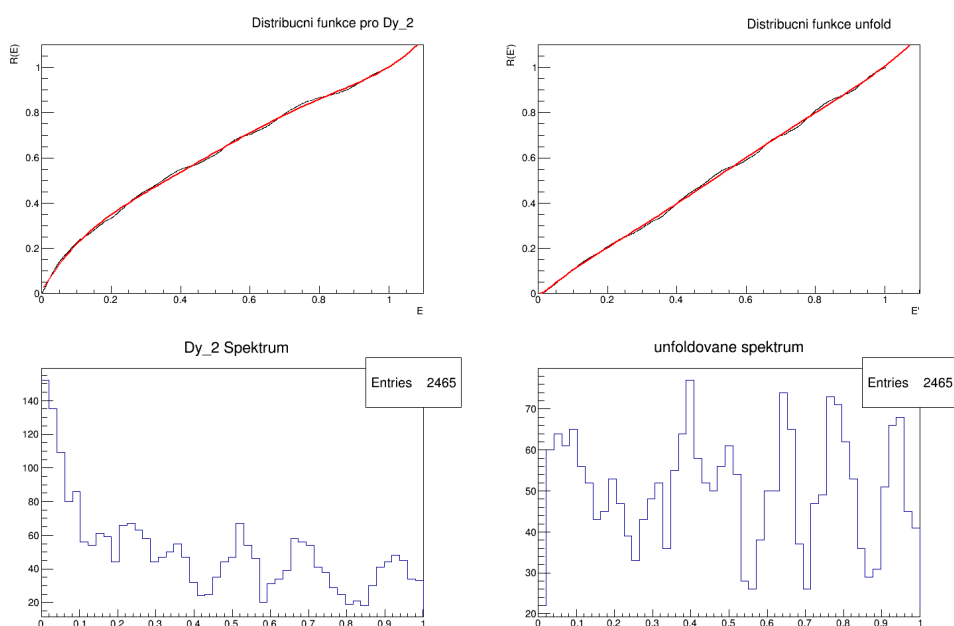
Na obrázku 10 vidíme, že data atomů dysprosia velmi dobře odpovídají simulacím regulárních systémů. Hodnota Brodyho parametru je o něco vyšší než na perfektní simulaci, co můžeme od reálných systémů očekávat. Data se podobají spíše mixovanému setu s poměrem 9:1 regulární ku chaotickým. I přesto můžeme sebevědomě prohlásit, že systém je regulární a vyšší hodnota Brodyho parametru je daná spíše šumem nebo zbytkem hladké části funkce.

Díky malému počtu dat dostáváme vysokou chybu pro jednotlivé biny, což zajišťuje dobré χ^2 , za cenu velké chyby pro Brodyho parametr.

Pro získání kvalitnějšího výsledku by bylo možné pracovat na intervalu uprostřed spektra, čím bychom ztratili části, které komplikují unfolding. Na druhou stranu bych zásadně snížil počet dat a tím navýšil význam šumu.

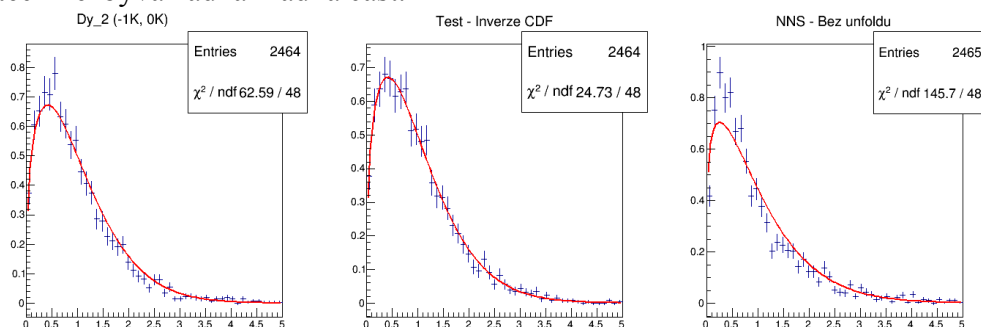
4.2 Molekuly Dy₂

Data pro molekuly ¹⁶²Dy₂ jsou dané simulováním molekul dysprosia za extrémně nízkých teplot za nulového magnetického pole. Data molekul za těchto podmínkách vykazují chaotické chování. Data jsou záporná, protože značí vazebnou energii a pro práci s nimi jsem otočil znaménko. Na výsledném NNSD se změna znaménka neprojeví, a proto si ji můžu dovolit. Pracujeme s sadou dat N = 2465, na které provádíme unfolding stejně jako pro data Dy.



Obrázek 11 Porovnání distribučních funkcí (nahore) a hustot hladin (dole) pro Dy spektrum před unfoldem (v levo) a po unfoldu (v pravo). Data byla z práce *Manifestation of quantum chaos in Fano-Feshbach resonances*^[8].

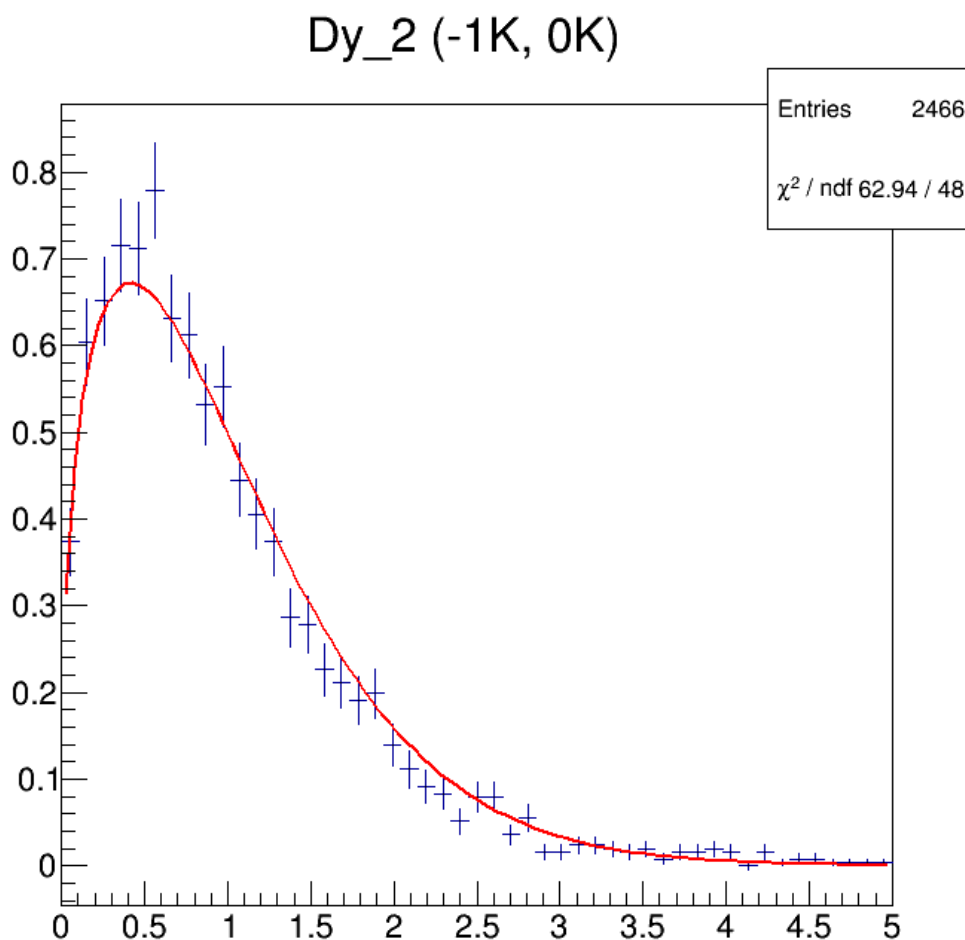
Na obrázku 11 vidíme spektrum Dy₂ před a po unfoldu. Zde polynom zvolený pro unfolding velmi dobře fituje distribuční funkci a unfoldovaná distribuční funkce je fitovaná přímkou. Pokud se podíváme na spektra před a po unfoldu vidíme, že v datech nezbyvá žádná hladká část.



Obrázek 12 Analogie k obrázku 8 Srovnání NNS a fitu Brodyho funkcí pro různé simulace kvantově chaotické sady dat. Unfoldovaného Dy₂ setu (vlevo, detail na obrázku 13), pseudonáhodně generovaného (testovacího) setu a stejného setu bez unfoldingu (v pravo). Hodnoty Brodyho parametru vycházejí jako: Unfoldovaný set $\omega = 0.99 \pm 0.02$ Testovací set $\omega = 1.00_{-0}^{+0.07}$ a Neunfoldovaný set $\omega = 0.83 \pm 0.02$.

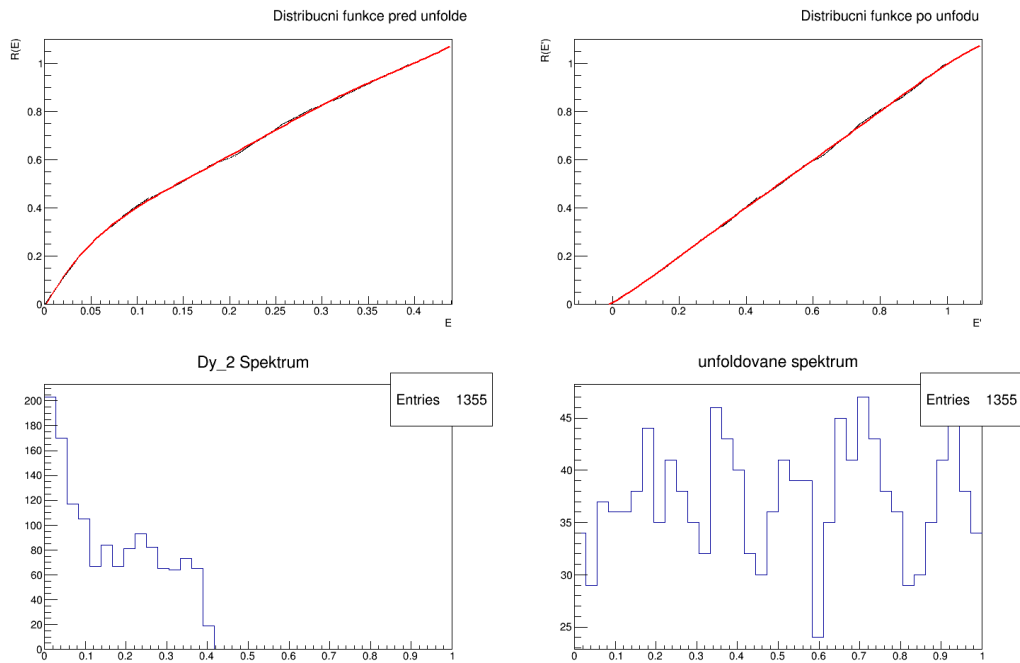
Na obrázku 13 je fit NNSD molekul dysprosia. Fit dává Brodyho parametr kolem 0.36, co je velmi dobře srovnatelné s simulací mixovaného spektra s poměrem 1:1 regulárních ku chaotickým.

Obrázek 12 demonstruje nutnost unfoldingu na reálných datech stejně jako obrázek 8 pro simulovaná data. Data, která neprošla unfoldingem, musela projít přeškálováním x-ové osy stejně jako data z obrázku 8. Kromě toho, že unfolding data převede na ideální škálu, také odstraní z sady dat vliv hladké části. V tomto konkrétním případě hladká část do dat přidá výrazný peak na začátku intervalu, který se na NNSD projeví jako navýšení hodnot v prvních několika bincích.



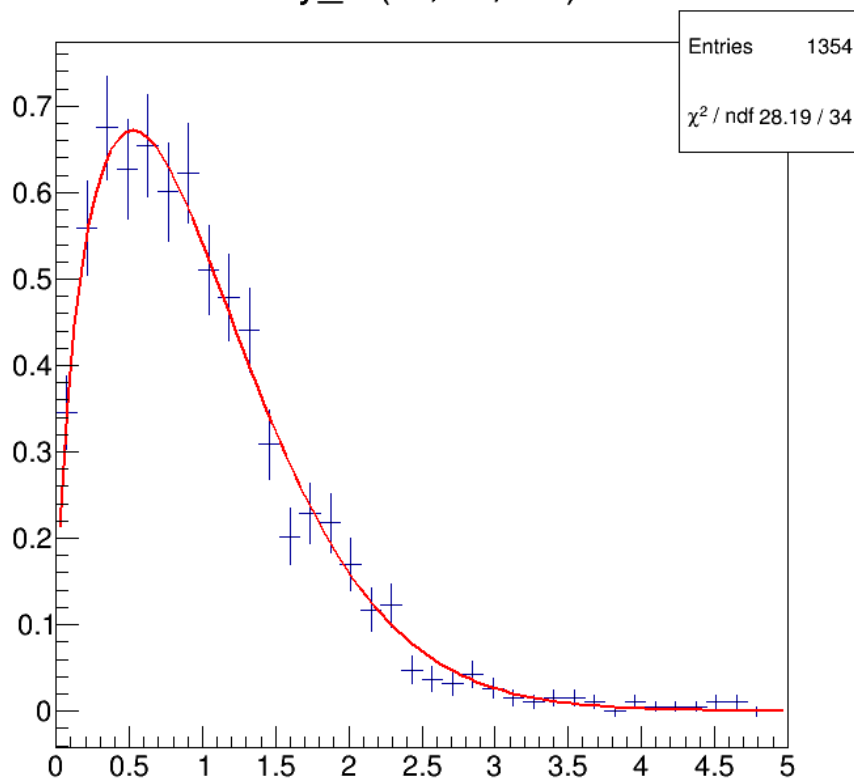
Obrázek 13 NNSD unfoldovaného spektra molekul dysprosia. Fit je dán Brodyho funkcí. Brodyho parametr vychází jako $0,36 \pm 0,02$. Redukované χ^2 vychází jako 1,3.

Obrázky 14 – 19 prezentují data, kde zmenšujeme zkoumaný interval, aby se energie blížily nule (disociační limitě^[10]). Zde očekáváme nejvýraznější chaos díky nejroستoucí hustotě stavů.

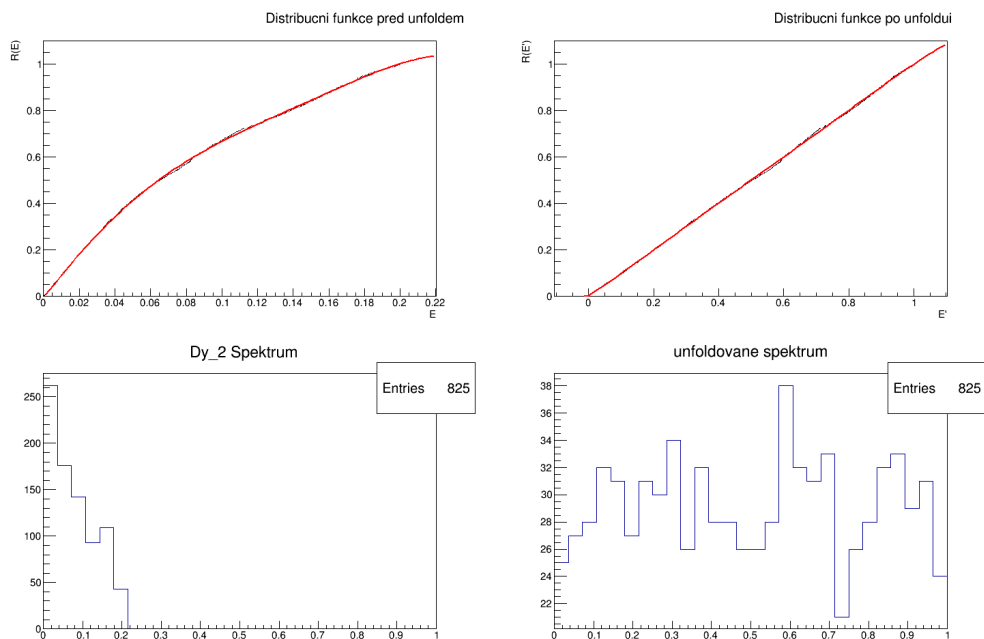


Obrázek 14 Porovnání distribučních funkcí (nahore) a hustot hladin (dole) pro Dy spektrum před unfolde (vlevo) a po unfoldu (vpravo). Data z intervalu redukovaného na $(-0.4, 0)$

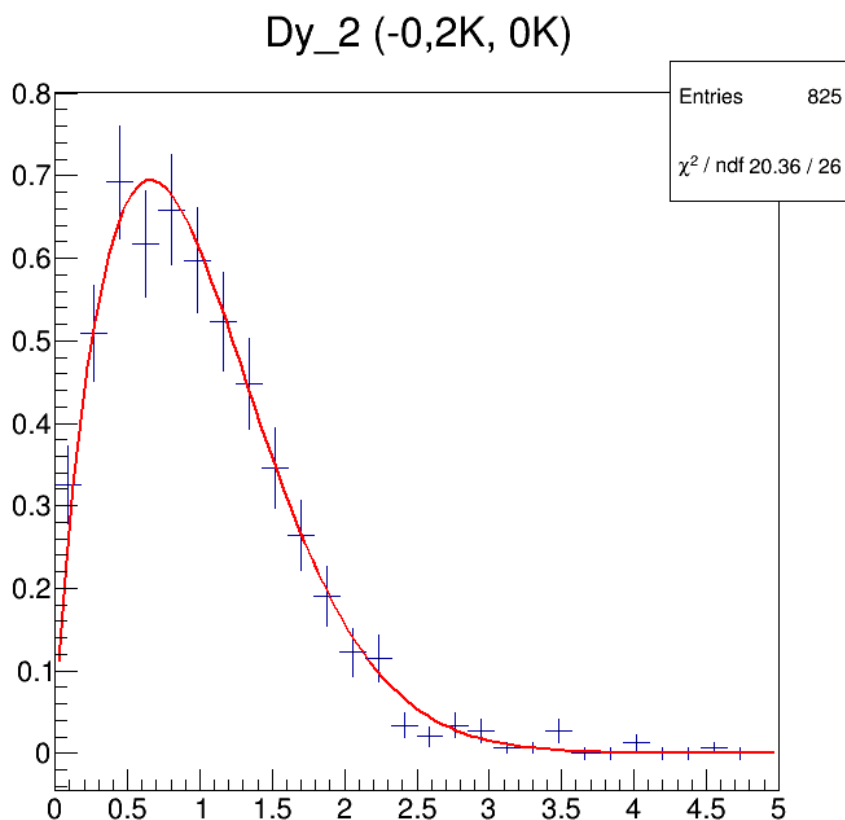
Dy_2 (-0,4K, 0K)



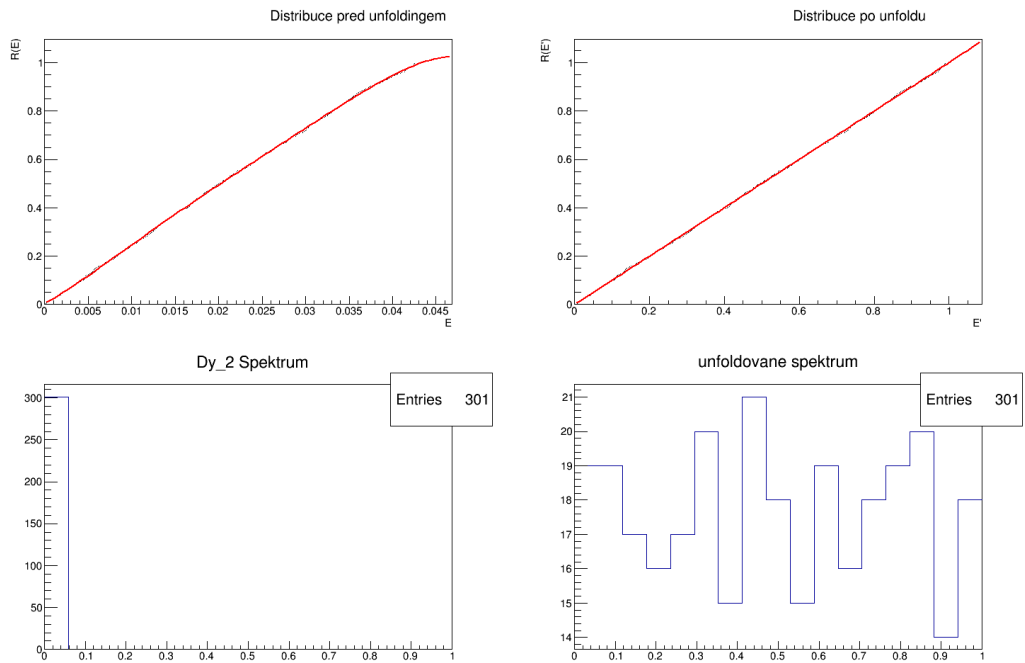
Obrázek 15 NNSD unfoldovaného spektra molekul dysprosia na redukovaném intervalu $(-0.4, 0)$. Fit je dán Brodyho funkcí. Brodyho parametr vychází jako $0,48 \pm 0,03$. Redukované χ^2 vychází jako 0,9.



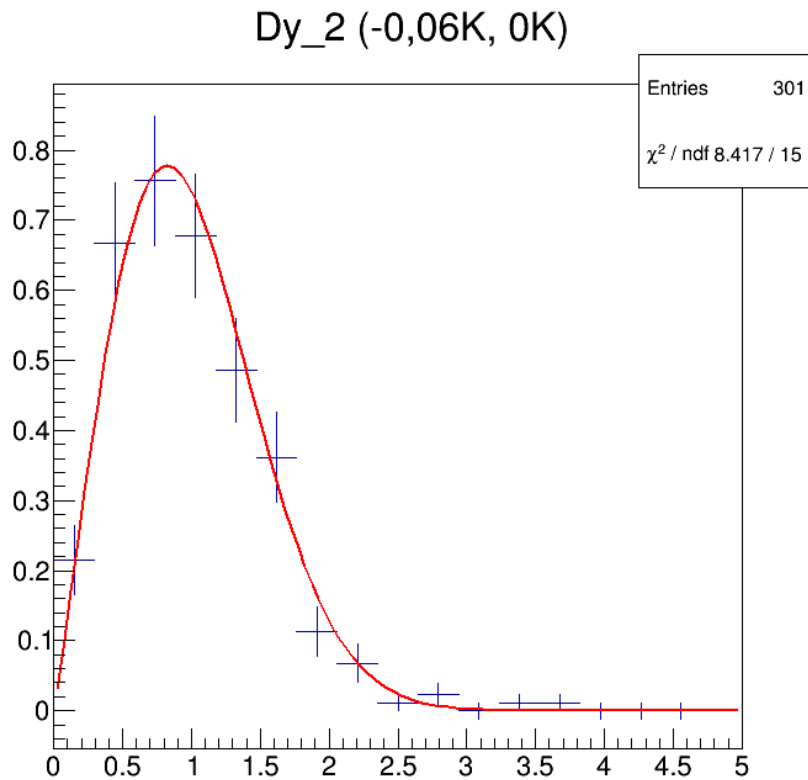
Obrázek 16 Porovnání distribučních funkcí (nahore) a hustot hladin (dole) pro Dy spektrum před unfoldem (v levo) a po unfoldu (v pravo). Data z intervalu redukovaného na $(-0.2, 0)$



Obrázek 17 NNSD unfoldovaného spektra molekul dysprosia na redukovaném intervalu $(-0.2, 0)$. Fit je dán Brodyho funkcí. Brodyho parametr vychází jako $0,69 \pm 0,05$. Redukované χ^2 vychází jako $0,8$.



Obrázek 18 Porovnání distribučních funkcí (nahore) a hustot hladin (dole) pro Dy spektrum před unfoldem (v levo) a po unfoldu (v pravo). Data z intervalu redukovaného na $(-0.06, 0)$.



Obrázek 19 NNSD unfoldovaného spektra molekul dysprosia na redukovaném intervalu $(-0.06, 0)$. Fit je dán Brodyho funkcí. Brodyho parametr vychází jako $\omega = 1.00^{+0.10}_{-0.02}$. Redukované χ^2 vychází jako 0,6.

Podle očekávání dostáváme větší Brodyho parametr pro data, která se blíží disociační limitě. Na intervalu $(-0.4, 0)$ dostáváme Brodyho parametr $\omega = 0,49 \pm 0,03$ a pokud interval zmenšíme na $(-0.2, 0)$ dostaneme Brodyho parametr kolem $\omega = 0,69 \pm 0,05$. Pokud se interval zmenšíme až na $(-0.06, 0)$, tak dostáváme data, kde fit Brodyho funkcí dává Brodyho parametr roven $\omega = 1_{-0.02}^{+0.10}$. Co velmi dobře odpovídá Wignerově distribuci (1.12).

Chaotické chování dostáváme pro data kolem disociační limity (nulové vazebné energie). Data kolem nulové vazebné energie jsou nejvíce hustá viz obrázek 11 a proto se zde chaos projevuje nejsilněji. Limita vazebné energie jdoucí k nule dále odpovídá stavům, kde dochází k Fano-Fesbachovým rezonancím.^[10] V této práci hledám chaos na ose, kde mám magnetické pole rovné 0, zatímco v pracích [8] a [9] hledáme chaos na spektru Fano-Fesbachových rezonancí, ke kterým dochází pro nulové vazebné energie. V práci [10] je prováděna statistika, kde jak magnetické pole, tak vazebná energii jsou volné parametry.

Závěr

V teoretické části jsem představil chaos v jak klasickém, tak kvantovém případě. Dále jsem uvedl základní pojmy pro práci s kvantově chaotickými spektry, především statistiku distribuce NNSD, která vypovídá o míře korelací ve zkoumaném spektru. Dále jsem představil tvary NNSD, které odpovídají klasickému (Poissonova distribuce (1.9)) a chaotickému případu (Wignerova distribuce(1.10)). Pro kvantifikaci chaosu fituji spektra pomocí Brodyho distribuce, která mezi Poissonovou a Wignerovou distribucí přechází v závislosti na 1 parametru.

V druhé části práce popisují statistické metody použité pro fitování a pro generaci testovacích sad dat. Na takto vygenerovaných datech jsem provedl test fitovacího nástroje. Dále vygeneruji mixované sady dat, které později budou sloužit jako reference pro srovnání s reálnými daty.

V třetí části práce jsem představil základní pojmy teorie náhodných matic a metodu unfolding, která upraví data do tvaru, jejichž NNSD je vhodný pro fit Brodyho. Nakonec na základě teorie náhodných matic nasimuluji sadu dat, která má kvantově chaotické vlastnosti.

V poslední části jsem studoval míru chaosu na reálných datech. Pro data atomů dysprosia jsem podle očekávání našel chování, které odpovídá Poissonově distribuci, studované spektrum nevykazuje chaotické chování. Při studiu dat molekul dysprosia jsem pozoroval chaos v malé míře na celém intervalu. Pokud jsem se omezoval na intervaly kolem disociační limity, tak jsem pozoroval tím výraznější chaotické chování, čím menší interval jsem volil. Toto se shoduje s očekáváním z experimentů v pracích [8] a [9] a teoretickému rozboru v práci [10].

Literatura

- [1] Devaney Robert L. An Introduction to Chaotic Dynamical Systems. second Edition. Addison-Wesley Publishing Company, Inc. Redwood City, California, (1987)
- [2] Stránský Pavel. Klasický a kvantový chaos v atomových jádrech. (Doktorská práce). Univerzita Karlova v Praze Matematicko-fyzikální fakulta (2009).
- [3] Berry Michael. Quantum chaology, not quantum chaos. *Physica Scripta*, 40(3), 335–336. (1989)
- [4] Wigner, E. Characteristic Vectors of Bordered Matrices With Infinite Dimensions. *Annals of Mathematics*, 62(3), second series, 548-564 (1955) .
- [5] Atas, Y., Bogomolny, E., Giraud, O., & Roux, G. (2013). Distribution of the Ratio of Consecutive Level Spacings in Random Matrix Ensembles. *Phys. Rev. Lett.*, 110, 084101.
- [6] Bohigas, O., Giannoni, M., & Schmit, C. Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation. *Phys. Rev. Lett.*, 52, 1–4. (1984).
- [7] Brody, T. A. A statistical measure for the repulsion of energy levels. *Lettere al Nuovo Cimento*. 1973, 7(12), 482-484. (1971-1985)
- [8] Frisch, A., Mark, M., Aikawa, K. et al. Quantum chaos in ultracold collisions of gas-phase erbium atoms. *Nature* 507, 475–479 (2014)
- [9] Maier T., Ferrier-Barbut I., Kadau H., Schmitt M., Wenzel M., Wink C., Pfau T., Jachymski K., and Julienne P. S. Broad universal Feshbach resonances in the chaotic spectrum of dysprosium atoms. *Phys. Rev. A* 92, 060702(R) – Published 14 December (2015)
- [10] Augustovičová, L. D. and J. L. Bohn. Manifestation of quantum chaos in Fano-Feshbach resonances. *Physical Review A* 98, p. 023419. (2018a)
- [11] Robert B. Ash Basic Probability Theory. Dover Publications, INC. Mineola, New York (2008)

[12] Pearson Karl F.R.S. X. On the criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables is such that it can be reasonably supposed to have arisen from random sampling. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 50:302, 157-175, (1900)

[13] Madan Lal Mehta Random Matrices. 3rd Edition. Elsevier/Academic press Amsterdam (2004)

[14] Kramida, A., Ralchenko, Yu., Reader, J., and NIST ASD Team. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.7.1), [Online]. (2019).

Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2020, July 21].

National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg.

Kód Pro generování dat GOE. Při spuštění toho kódu v programu <https://root.cern/> verze 5.34.36 dostanete jako výstup obrázek 8, data v konzoli vypsaná data v jednotlivých histogramech a parametry fitu pro každý z histogramů.

Kód:

```
{
//NNS spectrum

//pocet prvku
    int N = 1000;
    const int n = N+1;
    //Distribucni funkce rozdeleni hladin
    double Rdist[n];
    //vysledny set NNS rozdeleni pro set nahodnych cisel, odpovida poissonovu
    rozdeleji s lambda rovno 1
    double NNS[N];
    //NNS pro neunfoldovana data
    double NNSNU [N];

    //Generace symetricke matice
    double PreMatrix[n][n];
    TArrayD Symetrizace((n)*(n));
    TMatrixDSym A(n);

    //Vytvoreni vykreslovaci plochy
    c1 = new TCanvas ("c1","NNSD GOE dat", 1500,500);

    for (int i = 0; i<n; i++)
    {
        for (int j = 0; j <n; j++)
        {
            PreMatrix[i][j] = gRandom->Gaus(0,1);
            Symetrizace[(n)*i + j]=(PreMatrix[i][j] + PreMatrix[i][j])/2;
        }
    }
    A.SetMatrixArray(Symetrizace.GetArray());
    //ziskani spektra
    const TMatrixDSymEigen eigen(A);
    const TVectorD Spec = eigen.GetEigenValues();
    double Spektrum[n];
```

```

for (i=0; i<n;i++)
{
    Spektrum[i] = Spec[i];
}

for (i=0; i<N+1;i++)
{
    //CleanUp
    Rdist[i] = 0;
}
//Sort nahodneho setu
double X;
for(i=0; i<N+1;i++)
{
    for(j=0; j<N;j++)
    {
        if (Spektrum[j]<Spektrum[j+1])
        {
            X = Spektrum[j];
            Spektrum[j] = Spektrum[j+1];
            Spektrum[j+1] = X;
        }
    }
}
// generovani distributivni funkce
for (i = 0; i<N+1;i++)
{
    for (j = 0; j<N+1;j++)
    {
        if (Spektrum[i]>Spektrum[j])
            Rdist[i]++;
    }
    Rdist[i]= Rdist[i]/N;
}
//Vykresleni zavislosti distibuce na hladinach

g1 = new TGraph();
double x,y;
for (i = 0; i < N; i++)
{

```

```

    x = Spektrum[i];
    y = Rdist[i];
    //SetPoint (poradi bodu, x, y)
    g1-> SetPoint (i,x,y) ;

}

// Unfolding - polinomem 5 radu

g1 -> Fit ("pol5");
g1 -> SetMarkerSize (0.5);

// ziskani parametru fitu pro funkci  $ax^5 + bx^4 + cx^3 + dx^2 + ex + f$ 
double f = pol5 ->GetParameter(0);
double e = pol5 ->GetParameter(1);
double d = pol5 ->GetParameter(2);
double c = pol5 ->GetParameter(3);
double b = pol5 ->GetParameter(4);
double a = pol5 ->GetParameter(5);

//Generace unfoldovaneho setu podle nafitovane funkce
double unfold[N+1];
double Ei;
for (i=0;i<N+1;i++)
{
    Ei = Spektrum[i];
    unfold[i] = a*pow(Ei,5) + b*pow(Ei,4) + c*pow(Ei,3) + d*pow(Ei,2) + e*Ei
+ f;
    //cleanup
    Rdist[i] = 0;
}
//Ziskani distribucni funkce pro unfoldovany set
for (i = 0; i<N+1;i++)
{
    for (j = 0; j<N;j++)
    {
        if (unfold[i]>unfold[j])
            Rdist[i]++;
    }
    Rdist[i]= Rdist[i]/N;
}

```



```

}

//Definice brodyho funkce

TF1 *Brody = new
TF1("Brody", "([0]+1)*(pow((ROOT::Math::tgamma((([0]+2)/([0]+1))),
[0]+1))*pow(x,[0])*(exp(-pow((ROOT::Math::tgamma((([0]+2)/([0]+1))),
[0]+1)*pow(x,[0]+1))))",0,5);

//nastaveni Brodyho parametru w
Brody -> SetParameter (0,0.5);
Brody -> SetParLimits (0,0,1);
Brody -> SetParName (0, "w");
Brody -> Draw ();

//Vygenerovani NNS setu
for (i=0;i<N;i++)
{
    NNS[i] = (unfold[i] - unfold[i+1])*N;
}

//pocet binu
int Bin = pow(N,0.5);

TH1F *h1 = new TH1F("h1","NNS GOE", Bin, 0, 5);
for (i=0;i<n;i++)
{
    h1 -> Fill(NNS[i]);
}

//Test CDF
Brody -> SetParameter (0,1);
TH1F *h2 = new TH1F("h2","Test - Inverze CDF", Bin, 0, 5);
h2 -> FillRandom("Brody",N);

//Bez unfoldu
TH1F *h3 = new TH1F("h3","NNS - Bez unfoldu", Bin, 0, 5);

for (i=0;i<N;i++)
{
    //NNSNU musim jeste preskalovat x ovou osu, protoze zde neprobehl

```

unfolding

```
NNSNU[i] = (Spektrum[i] - Spektrum[i+1])*N/(Spektrum[0]-Spektrum[N]);  
}  
for (i=0;i<n;i++)  
{  
    h3 -> Fill(NNSNU[i]);  
}
```

// stanoveni chyb histogramu

```
double err =0;  
int mixBin =0;  
for ( i = 0; i < Bin; i++)  
{
```

//stanoveni chyb unfoldovane setu

```
    if(h1->GetBinContent(i) == 0)  
    {  
        h1->SetBinError (i,1);  
    }  
    else  
    {  
        err = pow(h1->GetBinContent(i),0.5);  
        h1->SetBinError (i,err);  
    }
```

//stanoveni chyb v testovacim setu

```
    if(h2->GetBinContent(i) == 0)  
    {  
        h2->SetBinError (i,1);  
    }  
    else  
    {  
        err = pow(h2->GetBinContent(i),0.5);  
        h2->SetBinError (i,err);  
    }
```

//stanoveni chyb v neunfoldovanem setu

```
    if(h3->GetBinContent(i) == 0)  
    {
```

```

    h3->SetBinError (i,1);
  }
  else
  {
    err = pow(h3->GetBinContent(i),0.5);
    h3->SetBinError (i,err);
  }

}

//Skalovani
h1->SetEntries(N);
Double_t norm = h1->GetEntries();
norm = norm*(h1->GetBinWidth(1));
h1->Scale(1/norm);

Double_t norm1 = h2->GetEntries();
norm1 = norm1*(h2->GetBinWidth(1));
h2->Scale(1/norm1);

Double_t norm2 = h3->GetEntries();
norm2 = norm2*(h3->GetBinWidth(1));
h3->Scale(1/norm2);

std::cout<<"=====  

=====\n";
        std::cout<<"=====  

histogramech ===== Data v  

=====\n";
std::cout<<"=====  

=====\n";

std::cout<<"\n";
std::cout<<"Unfoldovany set.\n";
std::cout<<"\n";

```

```

//fit
h1 -> Fit("Brody","P");

//vypsani poctu stupnu volnosti
int NDF =0;
TF1 *fit = h1->GetFunction("Brody");
NDF = fit->GetNDF();
std::cout<<"NDF ="<< NDF<<"\n";

std::cout<<"\n";
std::cout<<"Pseudonahodne generovany.\n";
std::cout<<"\n";

//fit
h2 -> Fit("Brody","P");

//vypsani poctu stupnu volnosti
NDF =0;
TF1 *fit1 = h2->GetFunction("Brody");
NDF = fit1->GetNDF();
std::cout<<"NDF ="<< NDF<<"\n";

std::cout<<"\n";
std::cout<<"Bez unfoldu.\n";
std::cout<<"\n";

//fit
h3 -> Fit("Brody","P");

//vypsani poctu stupnu volnosti
NDF = 0;
TF1 *fit2 = h2->GetFunction("Brody");
NDF = fit2->GetNDF();
std::cout<<"NDF ="<< NDF<<"\n";

```

```

//Vypsani dat
double Ven,XX;
std::cout<<"\n";
std::cout<<"Unfoldovany set.\n";
std::cout<<"\n";
std::cout<<"\n";
for (int i = 0; i < Bin;i++)
{
    XX = i;
    XX = (XX/Bin)*5;
    Ven = h1->GetBinContent(i);
    std::cout<< XX <<" " << Ven <<"\n";
}
std::cout<<"\n";
std::cout<<"Pseudonahodne generovany set.\n";
std::cout<<"\n";
std::cout<<"\n";
for (int i = 0; i < Bin;i++)
{
    XX = i;
    XX = (XX/Bin)*5;
    Ven = h2->GetBinContent(i);
    std::cout<< XX <<" " << Ven <<"\n";
}
std::cout<<"\n";
std::cout<<"bez unfoldu.\n";
std::cout<<"\n";
std::cout<<"\n";
for (int i = 0; i < Bin;i++)
{
    XX = i;
    XX = (XX/Bin)*5;
    Ven = h3->GetBinContent(i);
    std::cout<< XX <<" " << Ven <<"\n";
}

```

```
//vykresleni
c1 ->Clear();

c1 -> Divide(3,1);

c1 -> cd(1);
h1 -> Draw();

c1 -> cd(2);
h2 -> Draw();

c1 -> cd(3);
h3 -> Draw();

}
```