

**Proyecto Fin de Master en
Investigación Matemática.
Facultad de Ciencias Matemáticas**



Título: “Geometría simpléctica y cuantización.

Autor: D. José Manuel López Alonso.

Director: D. R. Campoamor Stursberg

Curso Académico: 2010-2011

Abstract

The symplectic geometry is at the heart of classical mechanics after the introduction as a model for geometric optics by Hamilton. After that, Hamilton himself applied his discoveries to classical mechanics. Wave optics can be seen as a mother theory for geometrical optics: this last theory can be produced from the first one by a contraction process, in the limit of zero wavelength. By other hand geometrical optics can be produced by symplectic linear maps defined over the phase space of an optical system, while non linear maps are known as aberrations.

The main purpose of this work is to study the connection between a classical phase space and the corresponding quantum Hilbert space taking the development of wave optics from geometrical optics as a guide. Especially the work is focused on the development of geometrical entities over the phase space that can be linked to quantum behavior or quantization processes.

These new geometrical structures are mainly produced by the introduction over the phase space of various Brownian motions modeled as \hat{I} to diffusions. These stochastic processes can be linked to various metric structures over the symplectic space. The relation of these metrics with the quantization processes is the final part of the work.

Key Words: Symplectic Geometry, Quantization, Stochastic Differential Equations, Brownian Motion.

MSC200: 53Z05 (Differential Geometry, Applications to Physics).

Resumen

La geometría simpléctica está en el centro de la mecánica clásica desde que Hamilton la introdujera como un modelo de la óptica geométrica. El propio Hamilton adaptó sus resultados para que sirviese como modelo de la dinámica de un sistema mecánico. Así, el estudio de la dinámica clásica aparece unido al de las variedades simplécticas. Tomando como analogía la dualidad entre óptica geométrica y ondulatoria, la primera puede verse como una aproximación de la segunda regida por un proceso de contracción o deformación a través del parámetro de la longitud de onda. Por otro lado, la óptica geométrica permite tratar, en principio, todas las transformaciones simplécticas del espacio de fases asociado. Las lineales dan lugar a la óptica lineal y gaussiana, mientras que las no lineales se conocen con el nombre de aberraciones.

El motivo del presente trabajo es analizar estas correspondencias entre el espacio de fases clásico y cuántico tomando como guía el paso de óptica geométrica a ondulatoria. Mediante esos paralelismos se trataría de indicar la relación de los principios de incertidumbre en espacios clásicos y cuánticos así como dilucidar la posible construcción de estructuras geométricas no triviales en espacios cuánticos con analogía con los clásicos a través de algunos procesos de cuantización descritos en la literatura al respecto.

Estas nuevas estructuras se basan en la introducción sobre una variedad simpléctica de un proceso estocástico de $\hat{I}t_0$ que permite la definición de estructuras métricas sobre la variedad. Se estudia la relación de estas métricas con los procesos de cuantización.

Términos clave: Geometría simpléctica, cuantización, Ecuaciones Diferenciales Estocásticas, Movimiento Browniano.

MSC200: 53Z05 (Geometría Diferencial, Aplicaciones a Física).

ÍNDICE

1. Introducción y motivación del trabajo.....	6
1.1 <i>Mecánica y variedades simplécticas</i>	7
1.1.1 <i>El caso de la óptica geométrica</i>	9
1.1.2 <i>Caracterización geométrica de la mecánica simpléctica</i>	11
1.2 <i>Los procesos de cuantización.</i>	12
1.2.1 <i>Cuantización canónica.</i>	12
1.2.2 <i>Deformación de álgebras</i>	15
1.2.3 <i>Otras cuantizaciones</i>	16
1.3 <i>Motivación y estructura del trabajo</i>	17
2. <i>Aleatoriedad y espacios de fases.</i>	19
2.1 <i>Aleatoriedad sobre el Hamiltoniano.</i>	19
2.2 <i>Punto de vista de las ecuaciones de evolución dinámicas.</i>	21
2.4 <i>Hamiltonianos puramente estocásticos</i>	31
2.4.1 <i>Resolución numérica de las ecuaciones</i>	36
2.5 <i>Difusión de \hat{I} y dinámica aleatoria.</i>	44
3. <i>Métricas sobre el espacio de fases</i>	47
3.1 <i>Vectores y variables aleatorias multidimensionales.</i>	48
3.2 <i>Métricas de Mahalanobis y tensores de difusión.</i>	52
3.3 <i>Algunos ejemplos</i>	56
3.4 <i>Métricas planas sobre el espacio de fases</i>	58
4. <i>Discusión y conclusiones finales.</i>	63
<i>Referencias Bibliográficas</i>	66

1. Introducción y motivación del trabajo.

A la edad de 19 años Hamilton presentó a la Royal Irish Academy un trabajo sobre óptica en el que estudiaba la propagación de los rayos de luz a través de la introducción de una función característica que englobaba las características físicas del sistema óptico. El trabajo fue rechazado en una primera versión, pero entre 1834 y 1835 Hamilton amplió dicho trabajo presentando la transformación óptica anterior como un ejemplo de lo que hoy se conoce como transformaciones canónicas sobre un espacio de fases.

Posteriormente, aplicó este mismo formalismo óptico a un sistema mecánico obteniendo las hoy denominadas ecuaciones de Hamilton de un sistema mecánico a partir de un principio variacional más amplio que los conocidos hasta el momento. El impulso definitivo hacia este tipo de mecánica fue dado por su contemporáneo Jacobi que estimuló el desarrollo del cálculo variacional y el estudio de los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales de primer orden [Goldstein 1987].

La principal virtud de la formulación Hamiltoniana es que la teoría matemática que está detrás, las variedades simplécticas, permite establecer múltiples enlaces entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica, así como con otras áreas donde la simplectización sea una parte importante: óptica geométrica, sistemas de ecuaciones diferenciales, etc. La gran variedad de sistemas físicos en los que la geometría simpléctica juega un papel importante ha llevado a algunos autores a hablar de una "simplectización de la física", especialmente desde hace unos 30 años [Guillemin 1984].

Para su formulación, la mecánica Hamiltoniana utiliza el espacio de fases del sistema físico que se representa matemáticamente por una variedad simpléctica. Estas estructuras simplécticas forman también la base del programa de "cuantización geométrica" donde se intenta realizar una cuantización del espacio de fases utilizando técnicas provenientes de la geometría diferencial [Simms, Woodhouse 1976].

1.1 Mecánica y variedades simplécticas

Las ecuaciones de movimiento de un sistema físico pueden obtenerse a partir de un principio variacional. Introduciendo una función Lagrangiana $L(q, \dot{q}, t)$, que depende de las coordenadas $q = (q_1, \dots, q_n)$ del sistema físico en un cierto espacio de configuración y de sus derivadas, se define una acción como:

$$\ell = \int_{t_0}^t L(q, \dot{q}, t) dt \quad (1.1)$$

Las ecuaciones para la curva solución $q(t)$ surgen de imponer que (1.1) sea un extremal. Eso conduce a las ecuaciones de Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (1.2)$$

que forman un sistema de n ecuaciones diferenciales de segundo orden [Goldstein 1987], muchas veces difíciles de resolver. En un sistema mecánico la función Lagrangiana es la diferencia entre la energía cinética del sistema que viene expresada en función de las derivadas de q (velocidades) y una función potencial que depende de las coordenadas q como, $L = T(\dot{q}) - V(q)$. En el caso de una partícula libre de masa m que se mueve bajo la acción potencial en un espacio unidimensional con coordenada de posición x , $L = 1/2 m \dot{x}^2 - V(x)$. Las ecuaciones de Lagrange darían como resultado:

$$\frac{d}{dt} (m \dot{x}) = - \frac{\partial V}{\partial x} = F \quad (1.3)$$

siendo F la fuerza derivada del potencial. Si la masa es constante, las ecuaciones se reducen a la segunda ley de Newton que es lo que en realidad enmascara la forma de (1.2) y la elección concreta de la función L que se usa para definir la acción. Por otro lado, el momento mecánico se define como $m \dot{x}$ que aparece en la parte izquierda de (1.3).

Llevado por esta analogía, la idea de Hamilton es la de la introducción de un nuevo y añadido sistema de coordenadas, denominadas momentos, definidos por:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (1.4)$$

Con esta introducción, el sistema físico pasa a estar representado por una cantidad doble de coordenadas (q_i, p_i) . Este nuevo espacio de dimensión $2n$ en la que se desarrolla la mecánica Hamiltoniana frente a la mecánica Lagrangiana se denomina espacio de fases del sistema. La introducción de los momentos permite introducir una nueva función H denominada Hamiltoniano del sistema y definida como:

$$H = \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - L \quad (1.5)$$

Si L se escoge como $T-V$ para que las ecuaciones resultantes concuerden con las de Newton, H resulta ser $T+V$, es decir, la energía del sistema. Es fácil comprobar que las ecuaciones de Lagrange se reescriben como:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (1.6)$$

Si se introduce el espacio de fases, las dos ecuaciones anteriores describen la evolución del vector $u=(q_i, p_i)$ como:

$$\frac{du}{dt} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial H / \partial q_i \\ \partial H / \partial p_i \end{pmatrix} = \mathbf{J} \nabla H \quad (1.7)$$

siendo $\mathbf{1}$ la matriz identidad $n \times n$ y \mathbf{J} la forma simpléctica asociada al espacio de fases en coordenadas canónicas. La existencia de esta forma permite introducir una operación entre funciones definidas sobre el espacio de fases. En particular si denotamos el sistema mediante el sistema $2n$ de coordenadas $x_i = (q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)$, se define el paréntesis de Poisson $\{f, g\}$ como:

$$\{f, g\} = J^{ij} \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial x_j} \quad (1.8)$$

donde se utiliza el convenio de Einstein sobre la sumación sobre índices dobles. Esta operación define un producto de funciones en el espacio de fases con las propiedades de linealidad, es antisimétrico, cumple la regla de Leibniz (es una derivación) y la identidad de Jacobi. En función de este producto, las ecuaciones de Hamilton se escriben de manera concisa como:

$$\frac{du}{dt} = \{u, H\} = L_H(u) \quad (1.9)$$

donde aparece definido el operador de Lie, L_H definido tal como aparece en (1.9) y las ecuaciones se toman componente a componente del vector u . La simplicidad de esta ecuación permitiría, al menos formalmente la integración inmediata de las ecuaciones como:

$$u_t = e^{\int L_H dt} u_0 \quad (1.10)$$

donde el operador que aparece actuando sobre u_0 se considera en sentido de la exponencial de un operador A como

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k \quad (1.11)$$

A pesar de que la solución, en principio formal, es conocida, su cálculo reviste en la mayoría de los casos gran complejidad dado que el operador definido en (1.10) puede tener problemas de convergencia y los L_H asociados al paso por diferentes puntos del espacio de fases pueden no conmutar. [Torre 2005]

1.1.1 El caso de la óptica geométrica

Tradicionalmente, los métodos variacionales aparecen en el terreno de la óptica con el principio de Fermat. Este principio variacional rige la propagación de los rayos de luz en un medio con índice de refracción n . El índice de refracción es una medida de la razón de la velocidad del rayo en el medio (v) respecto a la del vacío o medio que se toma como referencia (c) que se define como c/v [Sagrario 2004]. Dado que la velocidad en un medio es siempre menor que en vacío, el índice de refracción es mayor de 1.

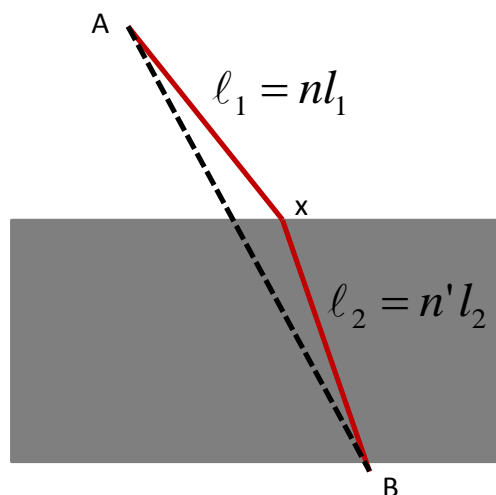


Figura 1.1: Principio de Fermat para el cálculo de la ley de la refracción. El rayo de luz no viaja directamente de A a B sino que pasando por C minimiza el camino óptico $\ell = n l_1 + n' l_2$.

Fermat estableció que, en el salto entre dos medios de índice de refracción distinto la luz no sigue el camino más corto geoméricamente, sino la línea a través del cual el camino óptico, definido como el producto del índice de refracción por el camino geométrico, es

un extremal (en la mayoría de los casos un mínimo). Si se calcula que punto "x" en la figura 1.1 verifica ese mínimo-extremal, se obtiene la ley de la refracción [Sagrario 2004].

Si el índice de refracción cambia con la posición, el camino óptico se calcula como:

$$\ell = \int_{P_1}^{P_2} n(x, y, z) ds = \int_{P_1}^{P_2} n(x, y, z) \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2} = \int_{P_1}^{P_2} n(x, y, z) \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dz}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dz}\right)^2} dz \quad (1.12)$$

siendo ds un elemento diferencial de longitud tomado a lo largo del arco definido por el rayo. La expresión anterior define un Lagrangiano óptico L_{opt} como:

$$L_{opt} = n(x, y, z) \sqrt{1 + (x')^2 + (y')^2} \quad (1.13)$$

donde $x' = dx/dz, y' = dy/dz$. Con ello pueden calcularse los momentos ópticos que resultan ser,

$$p_x = n(x, y, z) \frac{dx}{ds} = n \cdot \text{sen} \alpha_x$$

$$p_y = n(x, y, z) \frac{dy}{ds} = n \cdot \text{sen} \alpha_y \quad (1.14)$$

donde los ángulos son los explicitados a través de la figura 1.2

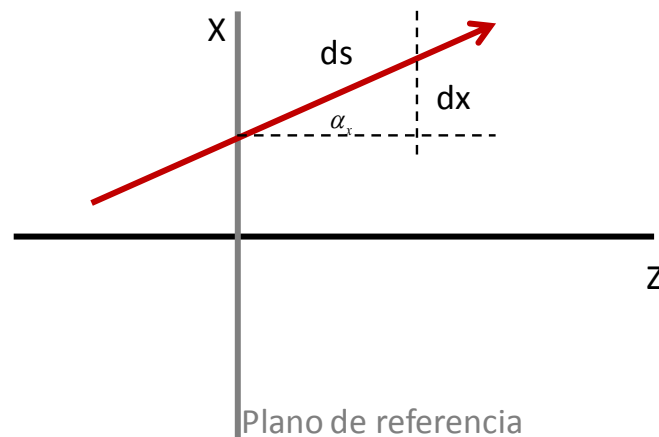


Figura 1.2: Sistemas de referencia usados en óptica Hamiltoniana. Un plano perpendicular a un eje tomado como eje óptico, generalmente el z, en un punto determinado se toma como sistema de coordenadas. Un rayo de luz queda especificado por la altura a la que corta al plano (coordenada de posición) y por la inclinación respecto a ese plano medido por el momento $p = n \cdot \text{seno}(\alpha)$. En el caso de la figura sólo se dibujan los rayos que viajan en el plano del dibujo.

Tras algo de álgebra este sistema físico puede caracterizarse también por un Hamiltoniano dado por:

$$H_{opt} = -\sqrt{n^2(x, y, z) - (p_x^2 + p_y^2)} \quad (1.15)$$

Este Hamiltoniano es altamente no lineal y las ecuaciones que surgen de él son bastante complicadas. Sin embargo, sobre todo para aplicaciones prácticas, interesa conocer, al menos la parte lineal de las ecuaciones solución (1.9) y (1.10), para lo cual, el Hamiltoniano debe contener, a lo sumo, términos cuadráticos. Afortunadamente, si los ángulos que forman los rayos con el eje óptico son pequeños y las superficies de separación entre medios no tienen grandes curvaturas, el Hamiltoniano óptico puede desarrollarse hasta segundo orden sin perder mucha precisión. Esta aproximación se conoce en óptica como aproximación paraxial [Torre 2005], [Sagrario 2004]. Bajo esta aproximación el Hamiltoniano óptico se escribe como:

$$H_{paraxial} = \frac{1}{2n_0(z)}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}q^T \Delta n \mathbf{H}_0 q \quad (1.16)$$

siendo Δn la diferencia de índices entre los medios que separa una superficie óptica, \mathbf{H}_0 el Hessiano que nos da las curvaturas de la superficie en el punto "0" considerado, n_0 el índice de la superficie en ese punto y $q=(q_x, q_y)$ las coordenadas de posición del rayo en el plano de referencia (ver figura 1.2). Observemos que este Hamiltoniano paraxial sería el de un oscilador armónico en dos dimensiones cuando sustituimos z por el tiempo t .

De igual modo a como se mostró en la sección anterior, podemos definir un corchete de Poisson sobre el espacio de fases óptico y las correspondientes ecuaciones de Hamilton, así como la forma simpléctica asociada.

La óptica paraxial puede verse entonces como el estudio de las transformaciones lineales simplécticas del espacio de fases [Torre 2005],[Guerrard 1975]. Si desarrollamos el Hamiltoniano hasta mayores órdenes produciremos transformaciones simplécticas no lineales sobre el espacio de fases óptico. A este último tipo de transformaciones se les conoce como aberraciones ópticas [Wolf 2004].

1.1.2 Caracterización geométrica de la mecánica simpléctica

Tomando como base los ejemplos anteriores, podemos definir en general una mecánica simpléctica sobre un espacio de fases de la manera siguiente:

- Sobre un espacio vectorial E de dimensión $2n$ se define una 2-forma antisimétrica y no degenerada. Si denominamos a esta forma ω , el par (E, ω) forma un espacio vectorial simpléctico. Aunque, en principio, dicha forma es arbitraria, guarda una estrecha relación con el principio variacional que se imponga sobre el espacio. Por un mecanismo similar al explicitado anteriormente para dar con la forma \mathbf{J} , el principio

variacional adoptado marca la forma antisimétrica y al revés [Guerra 1983],[Hofer 1994].

- La representación matricial de la forma $\omega(\mathbf{J})$ cumple, en virtud de las propiedades de ω que $\mathbf{J}^2 = -\mathbf{1}$, por lo que las ecuaciones de Hamilton (1.7) pueden escribirse

$$\mathbf{J}(du/dt) = -\nabla H \quad (1.17)$$

Si $u(t)$ es la curva solución de la dinámica, sus derivadas en cada punto del espacio de fases determinan un campo vectorial X_H tal que las ecuaciones del movimiento se pueden escribir en notación intrínseca como:

$$i_{X_H} \omega = -dH \quad (1.18)$$

- Así, la función Hamiltoniana determina la forma de contracción del campo vectorial solución con la forma simpléctica del espacio de fases.
- La forma ω permite la definición de un paréntesis de Poisson sobre el espacio de fases que establece un álgebra entre las funciones continuas y derivables que se pueden establecer sobre él.
- La dinámica también puede ser vista desde el punto de vista del conjunto de flujos Hamiltonianos producidos por el campo vectorial solución. Dichos flujos determinan mapas sobre el espacio de fases. La parte lineal de dichos mapas puede representarse mediante operadores matriciales que forman el grupo simpléctico. A lo largo de los últimos años se han aplicado técnicas de teoría de grupos para asociar elementos de este grupo a diversos sistemas físicos, en especial ópticos [Wolf 2004],[Torre 2005], [Simon 2000].

Las anteriores características son las más destacables, a modo de resumen, pero no son las únicas. El lector interesado puede remitirse a [Wolf 2004], [Hofer 1994], [Castillo 1989], [Guerrero 1995], [Torre 2005].

1.2 Los procesos de cuantización.

1.2.1 Cuantización canónica.

A comienzos del siglo XIX, un joven físico y médico, que participó incluso en el desciframiento del lenguaje jeroglífico egipcio, Thomas Young, realizó un famoso experimento en el que registraba la luz que se producía en una pantalla tras dos rendijas muy próximas entre sí. Para su sorpresa, la intensidad de la luz tenía máximos y mínimos de interferencia imposibles de explicar con, la todavía en boga, teoría corpuscular de la luz. Young observó que cuando la diferencia del camino óptico para rayos que provenían de las dos rendijas era un múltiplo entero de una cantidad λ

específica de cada color, se producía una interferencia constructiva y había más luz en ese punto de la pantalla mientras que era la distribución de luz disminuía en intensidad cuando no se cumplía esa condición.

Fresnel intentó explicar ese fenómeno asociando a cada punto del camino óptico recorrido por un rayo una fase compleja, de manera que si nos movemos a lo largo del rayo un camino l , se produce un cambio en la fase de $\exp(2\pi il/\lambda)$. En este sentido, la condición de Young para un máximo se podría explicar como:

$$\exp(2\pi i \frac{l(\gamma)}{\lambda}) = 1 \quad (1.19)$$

siendo $l(\gamma)$ el camino óptico asociado al trayecto γ . Si la luz llega a un punto Q procedente de varios caminos, cada rayo llevará una determinada cantidad de energía y fase que se sumará. La intensidad total sería proporcional al módulo cuadrado del número complejo resultante, pudiéndose producir, así, fenómenos de interferencia y difracción.

¿Cuál es la relación entre esta óptica ondulatoria y la anterior óptica geométrica que hemos descrito? Puede demostrarse que la óptica geométrica se recupera en el límite en que λ tiende a cero. Dada la pequeñez de esta longitud de onda en el caso de la luz visible, la óptica geométrica es una buena aproximación en muchos casos de interés [Cabrera 1998].

A principios del siglo XX, esta conexión entre la óptica ondulatoria y la óptica geométrica a través de la formulación de Hamilton había sido estudiada con cierta profundidad. Cuando la teoría cuántica apareció en escena con su dualidad onda corpúsculo y sus fenómenos ondulatorios asociados, Schrödinger inmediatamente pensó en esta conexión e intentó derivar una ecuación de ondas que, en el límite de algún parámetro análogo a la longitud de onda, recuperase la mecánica clásica.

Podemos interpretar la óptica de Fresnel como uno de los primeros procesos de cuantización, ya que no trata de determinar la asociación entre un rayo a la entrada del sistema con otro a la salida (transformaciones del espacio de fases), sino de asociar una distribución de luz a la entrada del sistema con una distribución a la salida. Es decir, una función con otra. Por tanto, la arena donde se desarrolla la dinámica es un espacio de funciones o espacio de Hilbert. De igual modo, ya no tendremos matrices simplécticas produciendo las transformaciones sobre el espacio de fases, sino que la dinámica vendrá representada por operadores en un espacio de Hilbert [Guillemin 1984].

A su vez, las funciones sobre el espacio de fases, que pueden asociarse con "observables" clásicos, pasarán a ser operadores en el espacio de Hilbert. El espacio de fases simpléctico de base está dotado de un álgebra para estos observables que, en el espacio de Hilbert, tendrá que convertirse en un álgebra de operadores.

Por tanto, un primer proceso de cuantización general sería el de asociar a todo espacio de fases simpléctico un espacio de Hilbert, de tal modo que exista una correspondencia entre el álgebra de los observables clásicos (paréntesis de Poisson) y el álgebra de los operadores que los representan en el espacio de Hilbert (conmutador). La principal dificultad radica en que este proceso de adscripción no es único en general debido a las relaciones de no conmutación entre los operadores cuánticos lo que conlleva problemas de "ordenación".

Sin embargo, para Hamiltonianos clásicos cuadráticos, el proceso anterior puede realizarse de manera precisa (cuantización canónica). Mediante este proceso el grupo simpléctico se pone en correspondencia 1:2 con el grupo correspondiente de operadores asociado. En este sentido este grupo es el doblemente recubridor o grupo metapléctico.

Realizando un paralelismo óptico, la óptica geométrica emerge de la geometría simpléctica del espacio de fases óptico, mientras que la óptica ondulatoria emerge de la geometría del grupo recubridor del grupo simpléctico, esto es, el grupo metapléctico. La evolución de la óptica geométrica implica flujos simplécticos a través de las ecuaciones de Hamilton asociadas. De la misma manera, la evolución ondulatoria estará asociada a flujos metaplécticos. Dada la relación entre los dos grupos, estos dos flujos no deberían estar desconectados; pudiéndose pasar de uno a otro mediante la relación que liga matrices simplécticas en el espacio de fases con operadores sobre el espacio de Hilbert. En esto consistiría la cuantización canónica en un espacio de fases óptico.

Lamentablemente, como ya se ha remarcado, tal proceso de asociación sólo es bien conocido en el caso de que la evolución del espacio de fases primario esté dada por un Hamiltoniano cuadrático. La generalización a Hamiltonianos de orden superior siempre tropieza con las dificultades en investigar las propiedades recubridoras de grupos generales que involucran transformaciones no lineales del espacio de fases (en el caso óptico, las aberraciones). El proceso de poner en correspondencia elementos del Hamiltoniano, matrices simplécticas sobre el espacio de fases y operadores sobre el espacio de Hilbert se denomina también como cuantización de Weyl. En ella se demuestra que, al menos para Hamiltonianos cuadráticos existe una correspondencia uno a uno entre flujos en el espacio de fases generados por ese Hamiltoniano y grupos de operadores uniparamétricos que satisfacen la ecuación de Schrödinger tras sustituir en el Hamiltoniano cada polinomio por su correspondiente operador. Estos conceptos y su posible ampliación hacia flujos no lineales pueden consultarse en la referencia [Gosson 2011].

El teorema de Groenwald-van Hove limita el uso de esta cuantización canónica ya que demuestra que el álgebra de los polinomios cuadráticos es un subálgebra máxima (bajo la operación del paréntesis de Poisson) del álgebra de todos los polinomios [Guillemin 1984] por lo que no hay manera de extender la representación metapléctica más allá de las transformaciones simplécticas asociadas a Hamiltonianos clásicos cuadráticos. Es

importante decir que este aparente resultado negativo no impide "otros" procesos de cuantización asociados a otros grupos no contenidos en la representación metapléctica [Guillemin 1984].

1.2.2 Deformación de álgebras

La mecánica cuántica se distingue generalmente de la mecánica clásica por el carácter de las cantidades observables. En el caso clásico, los observables son funciones sobre el espacio de fases con un producto entre ellas. En el caso cuántico los observables están sometidos a la no conmutatividad cuyo efecto más espectacular es el principio de incertidumbre de Heisenberg.

Esta analogía entre el álgebra de operadores en el escenario clásico y cuántico a través del paréntesis de Poisson (análogo clásico del conmutador cuántico entre operadores) ya fue señalado por Dirac [Dirac 1930]. Es natural pensar, entonces, en un conjunto de álgebras asociativas A_h , dependientes de un parámetro h , tal que A_0 sea el álgebra de observables clásica y A_h el de los observables cuánticos.

Formalmente estas álgebras se constituyen a partir de una familia de productos $*_h$ asociativos definidos como:

$$a *_h b = \sum B_j(a,b)h^j \quad (1.20)$$

Precisamente, el ejemplo fundamental de uno de estos productos $*$ es el producto de Moyal-Weyl, aplicable a aquellos espacios sobre los que esté definido un paréntesis de Poisson. Entre ellos, los más importantes son los espacios simplécticos. Si (x_1, \dots, x_m) son las coordenadas sobre espacio V y dado el álgebra generada por el corchete de Poisson $\{x_r, x_s\} = \pi_{rs}$, el operador B_j anterior en el producto de Moyal es:

$$B_j(a,b)(x) = \frac{1}{j!} \left(\frac{i}{2} \sum_{r,s} \pi_{rs} \frac{\partial}{\partial y_r} \frac{\partial}{\partial z_s} \right)^j a(y)b(z) \Big|_{y=z=x} \quad (1.21)$$

Si V es regular, entonces un operador como el dado en (1.21) puede construirse al menos localmente. El problema es como relacionar estas deformaciones locales para producir un producto estrella global. Un resultado interesante es que tal posibilidad es segura siempre que exista una conexión lineal plana y sin torsión para la cual la derivada covariante $\nabla\pi$ sea cero. En otros casos es todavía posible definir un producto estrella global con condiciones más estrictas. Para consultar más detenidamente los procesos de cuantización asociados a las deformación de álgebras se remite al lector a las siguientes referencias [Weinstein 1994],[Sternheimer 1998].

1.2.3 Otras cuantizaciones

Si bien los anteriores procesos de cuantización han sido los más estudiados en la literatura, no han sido los únicos. Los descritos hasta ahora se basan sobre todo en analogías matemáticas. Digamos que son las matemáticas las que guían el proceso para la cuantización.

Otros tipos de cuantizaciones buscan justificaciones “físicas” de los procesos cuánticos buscando analogías con sistemas clásicos que puedan exhibir algún tipo de comportamiento cuántico y que pueda dar pistas de lo que está detrás de la cuantización.

Un importante grupo de estos modelos es el de la **cuantización estocástica** desarrollada en un trabajo seminal por Nelson [Nelson 1966] y, posteriormente, por varios autores, [Misawa 1987], [Guerra 1983], [Lázaro-Camí 2007]. En este caso la teoría que lidera la analogía es la física estadística. La dinámica se modela mediante un proceso estocástico sobre el espacio de configuración del sistema que permite construir una función compleja que sigue en su evolución una ecuación análoga a la de Schrödinger que es, en realidad, una ecuación de difusión. Sin embargo, no aparece claramente cuál es la conexión física que generaría en primera instancia ese proceso estocástico. Si bien la formulación original de Nelson se centra sobre el espacio de configuración, otros autores han intentado acercar el planteamiento a una formulación sobre el espacio de fases [Guerra 1983]. Estos trabajos se vieron potenciados por el desarrollo del cálculo estocástico de Itô.

Otra vertiente interesante es la encabezada por Gerard 't Hooft. Este autor considera que muchas de las aparentes paradojas asociadas a la teoría cuántica provienen de un desconocimiento radical de las bases reales de la misma. Su propuesta es la de modelar la mecánica cuántica como una teoría resultante de procesos simples sobre unos grados de libertad de los que los observables macroscópicos son amalgamas complejas en donde los procesos asociados a la disipación y pérdida de información juegan un papel relevante. Sus esfuerzos ligan también algunas características cuánticas a una influencia de la ley de la gravedad. [Hooft 1988], [Hooft 1999]. La fuerte relación y analogía que existe entre la física estadística y la mecánica cuántica también ha llevado a otros autores a presentar la cuantización como una interferencia real entre un conjunto de sistemas, tomando como “reales” el conjunto de sistemas que parece describir un único sistema cuántico. [Smolin 2011].

Otra propuesta basada en la cuantización a partir del espacio de fases clásico es la propuesta por John R. Klauder, actualmente en la Universidad de Florida [Klauder 1996a]. Parte de la siguiente apreciación: casi todos los procedimientos de cuantización con un amplio respaldo experimental descansan sobre una forma específica del Hamiltoniano de base. Ahora bien, siempre podemos realizar un cambio de coordenadas

compatible con las forma simpléctica de las ecuaciones de Hamilton y expresar el Hamiltoniano matemáticamente de otra forma. Esta posibilidad es, cuando menos, paradójica ya que nada tan “físico” como el mecanismo de cuantización, debiera descansar sobre la posibilidad de atinar con el sistema de coordenadas adecuado. Este mismo planteamiento aparece también en la obra de Dirac : “.. La asunción de reemplazar coordenadas canónicas clásicas por su correspondiente operador (cuantización canónica de Weyl) en la práctica parece sólo funcionar cuando se aplica a un sistema de posición y momento referido a un sistema de coordenadas cartesiano y no a coordenadas curvilíneas generales..” [Dirac 1930] Ahora bien, como muy bien señala Klauber, coordenadas cartesianas globales sólo pueden existir en un espacio plano. De ahí pasa a mostrar como la cuantización canónica puede verse como una manera encubierta de introducir una métrica plana sobre el espacio de fases. Esta métrica está en principio relacionada con las incertidumbres en la posición y momento, aunque puede generalizarse a otros tipos de métricas siempre planas [Klauber 1996b]. La existencia de esta métrica plana puede utilizarse para definir estados coherentes (los análogos cuánticos de los estados clásicos de un sistema físico) y regularizar las integrales de camino que aparecen en la formulación de Feynmann. De este modo, la teoría cuántica no supone más flexibilidad, sino el añadido de una estructura adicional (métrica) sobre el espacio de fases. Dicha métrica es proporcional a la constante de Planck y, por tanto, totalmente irrelevante para objetos grandes.

1.3 Motivación y estructura del trabajo

Varias han sido las motivaciones y objetivos del trabajo:

1.- ¿Es posible fabricar sistemas cuánticos? Es decir, según hemos visto, los principales procesos de cuantización pueden realizarse matemáticamente, en un amplio conjunto de sistemas simplécticos. Sin embargo, lo cuántico está asociado a un pequeño grupo de sistemas físicos reales, quizás por la pequeñez de la constante de Planck.

2.- ¿Cuál es el origen y significado de esta constante? En la mayoría de los sistemas de cuantización más física, un modelo (proceso estocástico, etc) se introduce sobre el espacio de fases con una serie de parámetros entre los que suele aparecer una constante que juega el papel de la constante de Planck. En el presente trabajo nos hemos propuesto partir de modelos anclados en situaciones físicas concretas y ver si de ellos surgen constantes o estructuras relacionadas con los procesos de cuantización.

3.- Para ello se ha propuesto un modelo alternativo como es el de la óptica paraxial, a fin de poder contar siempre con algún tipo de interpretación física de los modelos matemáticos usados.

4.- A fin de poder comparar con los procesos descritos en las secciones anteriores, se partirá de un espacio de fases simpléctico con un Hamiltoniano cuadrático con la

interpretación o bien de un oscilador armónico o bien de una Hamiltoniano óptico paraxial.

Como línea general de trabajo se parte de la introducción de procesos estocásticos sobre el espacio de fases. La memoria se estructura según el siguiente criterio. Tras el capítulo presente de introducción, en el capítulo 2 se presentan los procesos estocásticos principales a estudiar y su relación con modelos físicos reales. Estos modelos nos llevarán a la introducción de movimientos Brownianos sobre el espacio de fases. En el capítulo 3 veremos cómo estos procesos Brownianos inducen métricas sobre el espacio de fases y se estudia el carácter plano o no de las mismas en relación con el movimiento Browniano introducido. Finalmente se describirán las principales conclusiones y líneas de trabajo futuras.

2. Aleatoriedad y espacios de fases.

La idea principal es introducir una aleatoriedad en el Hamiltoniano de un oscilador armónico y estudiar como esta aleatoriedad se manifiesta en los objetos matemáticos que pueden derivarse de él. En Mecánica Hamiltoniana podemos considerar el siguiente esquema simplificado. Sea un espacio de fases (M, w) simpléctico, siendo w la forma antisimétrica asociada, de dimensión 2. Sobre él se define una función Hamiltoniana $H(u) = H(q, p)$, siendo $u=(q, p)$ un punto de M denotando la variable de posición q y su momento conjugado p . La función H genera un campo vectorial X_H cuyo flujo asociado son las ecuaciones $u(t)=(q(t), p(t))$ dinámicas del sistema. Así que hay tres niveles de aleatoriedad: sobre la función Hamiltoniana, el campo vectorial asociado y el flujo provocado por el mismo.

2.1 Aleatoriedad sobre el Hamiltoniano.

Consideremos el caso de una Hamiltoniano del tipo:

$$H_\varepsilon(u) = \frac{1}{2}\mu p^2 + \frac{1}{2}Kq^2 \quad (2.1)$$

que sería el de un oscilador armónico de masa $m = 1/\mu$ y constante de recuperación K . El parámetro $\varepsilon = (K, \mu)$ es un índice que denota los valores concretos de (K, μ) . Supongamos ahora que μ y K son valores aleatorios, $\mu = \mu_0 + \Delta\mu$, $K = K_0 + \Delta K$, siendo $\Delta\mu, \Delta K$ variables aleatorias de media cero y varianzas σ_μ^2, σ_K^2 . (Podemos suponer que su distribución es gaussiana).

Con la nomenclatura anterior, sobre cada uno de los puntos u del espacio de fases se define una variable aleatoria que es el valor del Hamiltoniano en el punto u . Tras esta definición es lógico preguntarnos por el valor medio y la covarianza entre estas variables. En general, la variable ε es una variable bidimensional que asumiremos como una gaussiana multidimensional completamente determinada por su matriz de covarianzas S_ε dada por:

$$S_\varepsilon = \begin{bmatrix} \sigma_K^2 & C \\ C & \sigma_\mu^2 \end{bmatrix}, \quad (2.2)$$

Siendo $C = \rho\sigma_K\sigma_\mu$, el valor de la covarianza entre las variables (K,μ) y ρ , el coeficiente de correlación entre ellas. Con esta nomenclatura, para el caso del Hamiltoniano de la ecuación (2.1), su valor medio $E(H_\varepsilon(u))$ resulta:

$$E(H_\varepsilon(u)) = \frac{1}{2}\mu_0 p^2 + \frac{1}{2}K_0 q^2. \quad (2.3)$$

La covarianza entre las variables aleatorias sitas en u y u' se define como:

$$R(u, u') = E(H_\varepsilon(u)H_\varepsilon(u')) - E(H_\varepsilon(u))E(H_\varepsilon(u')) \quad (2.4)$$

Y realizando los cálculos necesarios el resultado puede expresarse como:

$$R(u, u') = \frac{1}{4}u^T S_{uu'} u' \quad (2.5)$$

donde $S_{uu'}$ es la matriz de covarianzas siguiente:

$$S_{uu'} = \begin{bmatrix} \sigma_K^2 qq' & Cqp' \\ Cpq' & \sigma_\mu^2 pp' \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

La varianza de cada una de las variables posicionadas en $u=(q,p)$ no es más que $R(u,u)$. Si la expresamos en la forma de la ecuación (2.5) se obtiene:

$$Var(u) = \frac{1}{4}u^T S_{uu} u = \frac{1}{4}u^T \begin{bmatrix} \sigma_K^2 q^2 & Cqp \\ Cpq & \sigma_\mu^2 p^2 \end{bmatrix} u = \frac{1}{4}(\sigma_K^2 q^4 + \sigma_\mu^2 p^4 + 2Cp^2 q^2) \quad (2.7)$$

Es importante recordar que la variable aleatoria que hemos definido, en cada punto del espacio de fases, es el valor del Hamiltoniano de la ecuación (2.1). A partir de aquí podemos realizar algunas aseveraciones:

- El conjunto de variables aleatorias definidas no son independientes.
- Sus valores en dos puntos diferentes u, u' del espacio de fases pueden tener covarianzas distintas de cero que vienen dadas por los valores no diagonales de (2.5).

2.2. Punto de vista de las ecuaciones de evolución dinámicas.

La siguiente pregunta a realizar es qué significa resolver las ecuaciones dinámicas asociadas al conjunto de Hamiltoniano de la ecuación (2.1). Vamos a considerar, de momento la siguiente interpretación: el Hamiltoniano de la ecuación (2.1) representa, en realidad, un conjunto de Hamiltonianos, uno para cada valor de la variable aleatoria bidimensional ε . Podemos, por tanto, resolver las ecuaciones de evolución dinámica para cada una de estas realizaciones y considerar magnitudes estadísticas sobre las curvas solución. En concreto, podemos preguntarnos sobre cuál es la curva media solución. Esto es lo que intentaremos resolver a continuación.

Las ecuaciones de Hamilton para un valor concreto de ε son:

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H_\varepsilon}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H_\varepsilon}{\partial q} \end{aligned} \quad (2.8)$$

Si introducimos la notación desarrollada en el apartado anterior, estas ecuaciones pueden escribirse como:

$$\dot{u} = (A_0 + \Delta A)u = \left\{ \begin{bmatrix} 0 & \mu_0 \\ -K_0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \Delta\mu \\ -\Delta K & 0 \end{bmatrix} \right\} \cdot \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix}, \quad (2.9)$$

cuya solución puede expresarse como:

$$u(t) = \begin{bmatrix} \cos wt & \frac{\mu}{w} \sin wt \\ -\frac{\mu}{w} \sin wt & \cos wt \end{bmatrix} \cdot u_0 \quad (2.10)$$

siendo $w = \sqrt{K\mu}$ la frecuencia de oscilación. La solución descrita por la ecuación (2.10) se corresponde con un valor concreto de K y de μ . Dado que estos dos valores son variables aleatorias de matriz de varianzas S_ε (ver ecuación (2.2)), la solución $u(t)$ describe en realidad un proceso estocástico en la variable "t", ya que para cada valor del tiempo tendremos una variable aleatoria según la frecuencia w va tomando diferentes valores. Para calcular su valor medio, deberíamos de tomar el valor medio de cada uno de los elementos de la matriz de la ecuación (2.10) considerando la función de distribución de probabilidad de la variable w . Esta variable sería la raíz cuadrada de la multiplicación de dos variables gaussianas con una correlación no nula entre ellas.

Una de las situaciones de más interés es considerar que las desviaciones provocadas por la aleatoriedad son pequeñas para poder hacer una estimación de la función de densidad de probabilidad de w . En efecto, si expandimos la expresión de w obtenemos

$$w = \sqrt{K\mu} = \sqrt{(K_0 + \Delta K)(\mu_0 + \Delta\mu)} = \sqrt{K_0\mu_0 + K_0\Delta\mu + \Delta K\mu_0 + \Delta K\Delta\mu} = \sqrt{w_0^2 + \alpha} \quad (2.11)$$

siendo w_0 la frecuencia de oscilación cuando no hay aleatoriedad y la constante α viene dada por,

$$\alpha = K_0\Delta\mu + \mu_0\Delta K + \Delta K\Delta\mu \quad . \quad (2.12)$$

Considerar que la aleatoriedad es pequeña es hacer que $\alpha/w_0^2 \ll 1$, por lo que se puede desarrollar la raíz cuadrada de la ecuación (2.11) y quedarnos con el término lineal en α . El resultado final es que la frecuencia de oscilación w puede expresarse como,

$$w = w_0 \sqrt{1 + \frac{\alpha}{w_0^2}} \cong w_0 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{w_0^2}\right) = w_0 + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{w_0} \quad , \quad (2.13)$$

con el valor de α dado por la ecuación (2.12). Así pues, el planteamiento anterior supone considerar que la frecuencia de oscilación w es una variable aleatoria cuya función de densidad de probabilidad vendrá regida por la de la variable α . Según la expresión (2.12), esta variable se compone de la suma de dos partes claramente diferenciadas. La primera es la combinación lineal de dos variables gaussianas que hemos supuesto tienen una distribución multinormal con matriz de covarianzas S dada por (2.2). La segunda parte de la variable es el producto de dos variables gaussianas de media cero matriz de covarianzas S . Su función de densidad de probabilidad conjunta viene dada por:

$$f_{\varepsilon=(\Delta K, \Delta\mu)} = \frac{1}{2\pi|S|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}\varepsilon^T S^{-1}\varepsilon} \quad (2.14)$$

El problema de calcular la función de distribución producto no es un asunto trivial dado que la solución formal es difícil de calcular en muchas ocasiones. Sin embargo, en el caso de distribuciones normales y en algunos casos de multinormales el resultado final puede expresarse analíticamente.

Sean X e Y dos variables aleatorias de distribución conjunta $f_{X,Y}$, su producto $v=xy$ se distribuye como, [Glen 2002], [Rohatgi 1976]:

$$f_V(v) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{X,x}(x, \frac{v}{x}) \frac{1}{|x|} dx \quad (2.15)$$

Denotando como v a la nueva variable producto $v = \Delta K \Delta \mu$, y aplicando a nuestro caso las ecuaciones (2.14) y (2.15) podemos calcular la función densidad de probabilidad del producto. Las matrices S y S^{-1} son fácilmente calculables:

$$S = \begin{bmatrix} \sigma_K^2 & C \\ C & \sigma_\mu^2 \end{bmatrix} \Rightarrow S^{-1} = \frac{1}{\sigma_K^2 \sigma_\mu^2 - C^2} \begin{bmatrix} \sigma_\mu^2 & -C \\ -C & \sigma_K^2 \end{bmatrix} = \frac{1}{|S|} \begin{bmatrix} \sigma_\mu^2 & -C \\ -C & \sigma_K^2 \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

Introduciendo (2.14) y (2.16) en (2.15), resulta finalmente:

$$\begin{aligned} f_{\Delta K, \Delta \mu} &= \frac{1}{2\pi |S|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2|S|} \{ \Delta K^2 \sigma_\mu^2 - 2C \Delta K \Delta \mu + \Delta \mu^2 \sigma_K^2 \}} \\ &\Downarrow \\ f_V(v) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f_{\Delta K, \Delta \mu}(\Delta K, \frac{v}{\Delta K}) \frac{1}{|\Delta K|} d(\Delta K) \\ &\Downarrow \\ f_V(v) &= \frac{1}{2\pi |S|^{1/2}} e^{\frac{1}{|S|} C v} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2|S|} (x^2 \sigma_\mu^2 + \sigma_K^2 \frac{v^2}{x^2})} \frac{1}{|x|} dx \end{aligned} \quad (2.17)$$

La última forma de la expresión (2.17) contiene una integral que describe una función simétrica respecto de cero que puede ser escrita como el doble de una integral entre cero e infinito. Bajo esta forma es integral resulta ser la función de Bessel tipo K de orden cero, $B_{K,0}$. Reagrupando términos obtenemos finalmente:

$$f_V(v) = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{1}{|S|^{1/2}} e^{\frac{1}{|S|} C v} \right\} B_{K,0} \left(\frac{\sigma_K \sigma_\mu}{|S|} |v| \right) \quad (2.18)$$

donde, recordemos $C = \rho \sigma_K \sigma_\mu$, siendo ρ la correlación entre ΔK y $\Delta \mu$. La función descrita en (2.18) tiene interesantes propiedades:

- Su dependencia de la función de Bessel $B_{K,0}$ hace que no esté acotada en el punto $v=0$ y decae rápidamente a ambos lados de este punto, siendo una función simétrica.
- Si las variables ΔK y $\Delta \mu$ exhiben correlación, aparece un factor adicional creciente, si la correlación es positiva o decreciente, si es negativa. En cualquier caso, representa un factor que no es simétrico para valores de

v positivos y negativos, por lo que introduce una cierta asimetría en la función.

En la figura siguiente se ha representado dicha función para el caso de $\sigma_K=0.1$, $\sigma_\mu=0.3$ y un valor de la correlación ρ que varía entre 0.1, 0.6 y -0.6. Es posible ver las dos características anteriores; su no acotación en torno al cero, su asimetría dependiendo del valor de la correlación y su rápida caída a ambos lados del valor $v=0$.

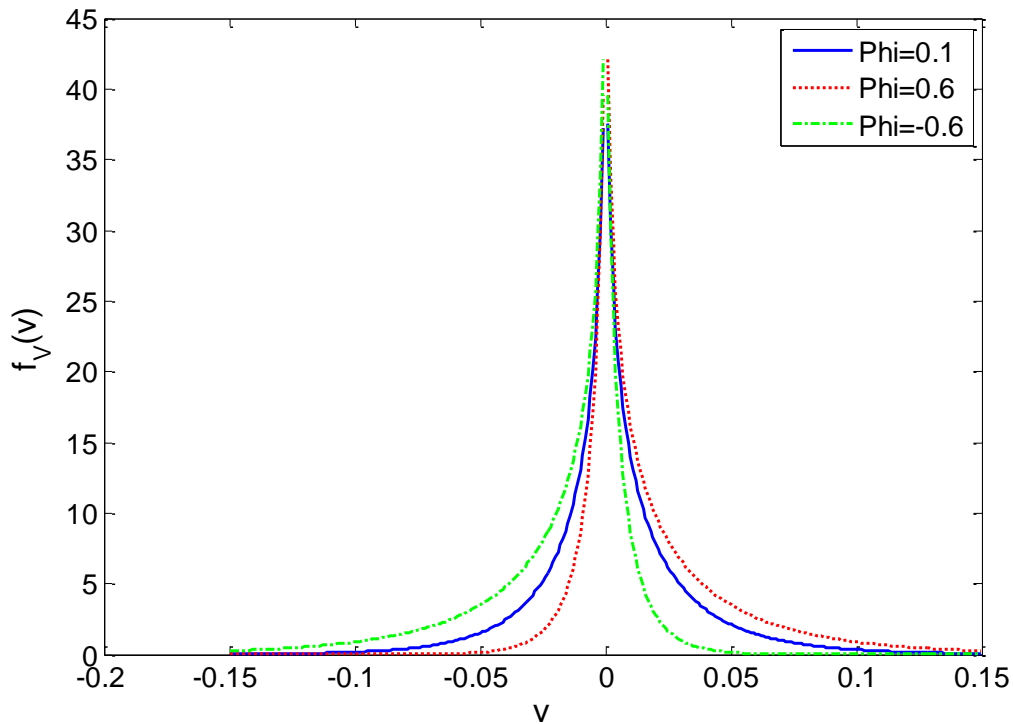


Figura 2.1: Representación de la función $f_v(v)$ para varios valores de la correlación Φ entre las variables ΔK y $\Delta\mu$. Los valores para el resto de las variables aparecen en el texto.

En realidad, la expresión (2.18) describe una distribución más que una función. Lo importante es darse cuenta de que esta distribución se asemeja bastante a una delta de Dirac $\delta(v)$. Si el valor de la correlación entre las variables fuese cero, no habría gran diferencia.

La otra dependencia de la variable α consiste en una combinación lineal de ΔK y $\Delta\mu$. Concretamente, $p = K_0\Delta\mu + \mu_0\Delta K$. Esta variable será gaussiana de media cero y varianza dada por $K_0^2\sigma_\mu^2 + \mu_0^2\sigma_K^2 + 2w_0^2C$ tomando en consideración que las variables ΔK y $\Delta\mu$ son multinormales con matriz de covarianzas S [Morrison 1990]. Por tanto, la variable α es la suma de dos variables aleatorias de distribución conocida. Sin embargo,

ambas partes de α dependen de las mismas variables base (ΔK y $\Delta\mu$) y puede que no sean independientes. Para serlo, todos los momentos conjuntos de ambas partes de α deberían de ser cero. Este primer momento conjunto, la covarianza entre p y v , se expresa como,

$$Var(p, v) = E[pv] - E[p]E[v] = E[pv] = E[K_0\Delta K(\Delta\mu)^2 + \mu_0(\Delta K)^2\Delta\mu] \quad (2.19)$$

Que, como vemos, involucra los momentos y cumulantes de orden 3 de la distribución multinormal original. Será por tanto cero. El resto de momentos y cumulantes de mayor orden también se expresarán como combinaciones de alto orden de los de la multinormal original. Salvo los de orden par, todos serán cero y los de orden par involucrarán potencias de ΔK y $\Delta\mu$ superiores a 2. Pero estos son los términos que se han despreciado en primer término para llegar a expresar la variable α según la ecuación (2.11) y (2.12). Luego, si, de nuevo, la aleatoriedad es pequeña, las variables p y v son cuasi-independientes en una buena aproximación.

En este caso, la función densidad de probabilidad final de la variable α será la convolución de una gaussiana con $f_V(v)$. Y por la discusión anterior sobre el carácter de esta última función, el resultado final de la convolución será, en la aproximación de aleatoriedad pequeña, una gaussiana, ya que sería como convolucionar una función con una función muy próxima a una delta de Dirac (la función $f_V(v)$).

Teniendo en cuenta todas las consideraciones anteriores hemos llegado a la conclusión de que α debe ser, aproximadamente, una variable aleatoria cuya distribución de densidad de probabilidad está muy cerca de ser una gaussiana si el valor de aleatoriedad es pequeño y la correlación entre las variables no muy alta (para mantener la simetría de $f_V(v)$). Por tanto, está completamente determinada por su valor medio $\bar{\alpha}$ y su varianza σ_α^2 . Ambas cantidades pueden calcularse directamente a través de la ecuación (2.12), tomando valores medios y usando de nuevo la multinormalidad de ΔK y $\Delta\mu$. El resultado final es:

$$\begin{aligned} \bar{\alpha} &= C \\ \sigma_\alpha^2 &= K_0^2\sigma_\mu^2 + \mu_0^2\sigma_K^2 + 2w_0^2C + \{\sigma_\mu^2\sigma_K^2 + 2C^2\} \end{aligned} \quad (2.20)$$

donde los dos últimos términos en la varianza de α provienen de considerar los términos en $E(\Delta K^2\Delta\mu^2)$ para los que se ha usado la multinormalidad de las variables. Finalmente, relacionando la variable α con la frecuencia de oscilación w (ecuación (2.13)), tenemos que, dentro de las aproximaciones tomadas, la frecuencia de oscilación es una variable aleatoria gaussiana con media y varianza:

$$\begin{aligned} \bar{w} &= w_0 + \frac{C}{2w_0} \\ \sigma_w^2 &= \frac{1}{4w_0^2}\sigma_\alpha^2 \end{aligned} \quad (2.21)$$

En las figuras siguientes aparece una representación con cálculo numérico para la variable α que hemos estado discutiendo. En la columna de la izquierda aparece el valor de la parte puramente gaussiana junto con la convolución de esta parte con la función $f_V(v)$. En la parte izquierda, aparece representado el valor de $f_V(v)$. Tal como puede apreciarse, solamente para valores elevados de la aleatoriedad y de las correlaciones, los dos tipos de aproximación comienzan a ser diferentes. Puede apreciarse también como, a medida que aumenta el valor de la correlación, la distribución $f_V(v)$ se vuelve más asimétrica.

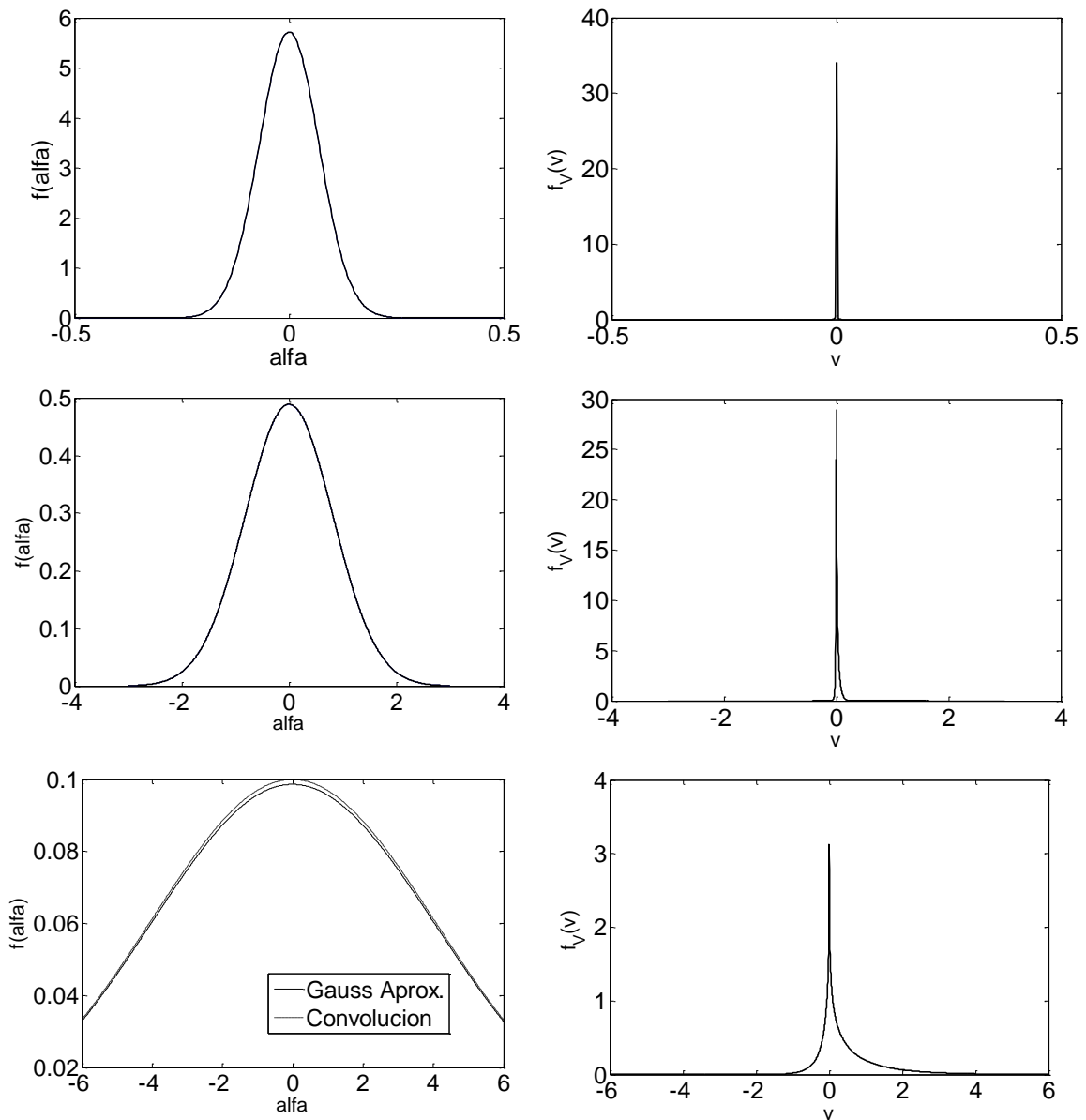


Figura 2.2: Función de densidad de probabilidad para la variable α . A la izquierda se representa la parte gaussiana junto a la parte final de convolución con $f_V(v)$. A la derecha aparece representada la distribución $f_V(v)$. Los valores de simulación son los siguientes. Para todas las gráficas $w_0^2 = 6$. Para el resto de valores, comenzando por la parte superior: $\sigma_K=0.01,0.1,0.9$; $\sigma_\mu=0.03,0.3,0.9$; $\rho=0.1,0.6,0.6$.

A fin de tener una última comprobación se realiza el cálculo siguiente. Hasta ahora hemos obtenido que la frecuencia de oscilación sigue una distribución gaussiana que viene determinada por los parámetros dados (2.21). Podemos comparar esta distribución directamente con una simulación experimental en la que se calcula directamente la distribución de w . Para ello se calcula numéricamente ΔK e $\Delta\mu$ como:

$$\begin{pmatrix} \Delta\mu \\ \Delta K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_\mu & 0 \\ \sigma_K \rho & \sigma_K \sqrt{1-\rho^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_\mu \\ n_K \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

siendo n_μ y n_K variables normales de media cero y varianza unidad. Puede comprobarse fácilmente que las variables ΔK e $\Delta\mu$ calculadas a través de (2.22) tienen matriz de covarianzas S , según se ha definido en el presente trabajo (ecuación (2.2)). Es pues fácil generar una larga secuencia de valores aleatorios n_μ y n_K . A partir de ahí, calcular (2.22) y sumar el resultado a valores prefijados de μ_0 y K_0 que son los que definen el valor de la frecuencia de oscilación w_0 .

Dichos cálculos se han implementado en MATLAB y la distribución experimental de w se aproxima a través del histograma de los resultados con 50000 valores. Los resultados aparecen en las gráficas 2.3 y 2.4. Como puede verse, el resultado de la aproximación realizada es muy bueno comparado con la aproximación al histograma real. De nuevo, existe una pequeña desviación para el caso de correlaciones altas y aleatoriedad elevada. Por comodidad sólo se han representado dos casos típicos: los correspondientes a alta y baja aleatoriedad y correlación. En las dos gráficas, w_0 toma el valor 4.

Conocida ya la distribución de la densidad de probabilidad de w , la solución media de las ecuaciones de evolución se calculan tomando medias respecto de w en la ecuación (2.10). Esto es:

$$\langle u(t) \rangle = \begin{bmatrix} \langle \cos(wt) \rangle & \langle \frac{\mu}{w} \sin(wt) \rangle \\ \langle -\frac{\mu}{w} \sin(wt) \rangle & \langle \cos(wt) \rangle \end{bmatrix} u_0 \quad (2.23)$$

donde el corchete \langle, \rangle denota media respecto de la variable w . El cálculo explícito de este último resultado puede ser complicado por el término en el seno. Pero, no obstante, es fácil darse cuenta de que esta solución no es la solución asociada al Hamiltoniano medio sin valores de ruido. Para ello fijémonos en la condición inicial $u_0 = (q_0, 0)$ y estudiemos solamente el valor medio de la posición $\langle \cos(wt) \rangle$. Para una distribución gaussiana, la función característica de la misma nos dice:

$$E[e^{ix}] = e^{i\bar{x} - \frac{\sigma_x^2 t^2}{2}} \quad (2.24),$$

siendo \bar{x} , σ_x^2 , la media y la desviación estándar de la variable x . Por medio de (2.24) es fácil ver que:

$$\langle q(t) \rangle = q_0 \langle \cos(\omega t) \rangle = q_0 e^{-\frac{1}{2}\sigma_w^2 t^2} \cos(\bar{\omega} t) \quad (2.25)$$

donde σ_w^2 y $\bar{\omega}$ vienen dadas por las ecuaciones (2.21). Respecto al comportamiento de esta solución podemos destacar varios aspectos:

- La frecuencia de oscilación ω no es la frecuencia de oscilación asociada al Hamiltoniano medio, ω_0 . Su valor difiere de éste solamente si las variables ΔK e $\Delta \mu$ están correlacionadas.
- La solución es una solución disipativa, que decrece con el tiempo. Es la existencia de este factor disipativo lo que más aleja a la solución media de la solución del Hamiltoniano medio. De nuevo, este factor está dominado por el valor de correlación de las variables ΔK e $\Delta \mu$ (ver ecuaciones (2.20),(2.21)).
- La solución media cumple la siguiente ecuación diferencial de segundo orden:

$$\frac{d^2 q}{dt^2} = -(\bar{\omega}^2 + \sigma_w^2 + \sigma_w^2 t)q - (\sigma_w^2 t + 1) \frac{dq}{dt} \quad (2.26)$$

Esta ecuación describe un oscilador con fricción y un desplazamiento de la frecuencia que viene incluido en el factor de $\bar{\omega}$.

Un modelo físico para este tipo de aleatoriedad podría ser un metamaterial con desorden. Los metamateriales con compuestos artificiales que son ensamblados mediante técnicas químicas, físicas u ópticas de tal modo que presentan propiedades que no se dan de forma natural. De especial interés son los materiales que presentan en algún rango de longitud de onda índices de refracción negativos. Dado que uno de los objetivos del trabajo es encontrar modelos físicos que implementen los modelos matemáticos presentados se ha realizado un análisis computacional de un metamaterial compuesto por bloques perfectamente ordenados cuya posición dentro de una cadena es una variable aleatoria. Las características de la resonancia en estos materiales hacen que el Hamiltoniano total sea del tipo de oscilador armónico con la aleatoriedad en constantes que se ha presentado. El modelo semianalítico desarrollado calcula una gran cantidad de estas cadenas aleatorias y estudia la media de sus respuestas en resonancia. Posteriormente estas soluciones son estudiadas estadísticamente para comprobar si, aparte del efecto disipativo, hay algo más presente en un Hamiltoniano real del tipo descrito en este trabajo. Los resultados han sido aceptados para publicación y confirman los resultados expuestos hasta aquí: la resonancia se desplaza y baja en amplitud en completo acuerdo con la existencia de una fricción o elemento disipativo. El trabajo se encuentra en publicación [Rico 2011].

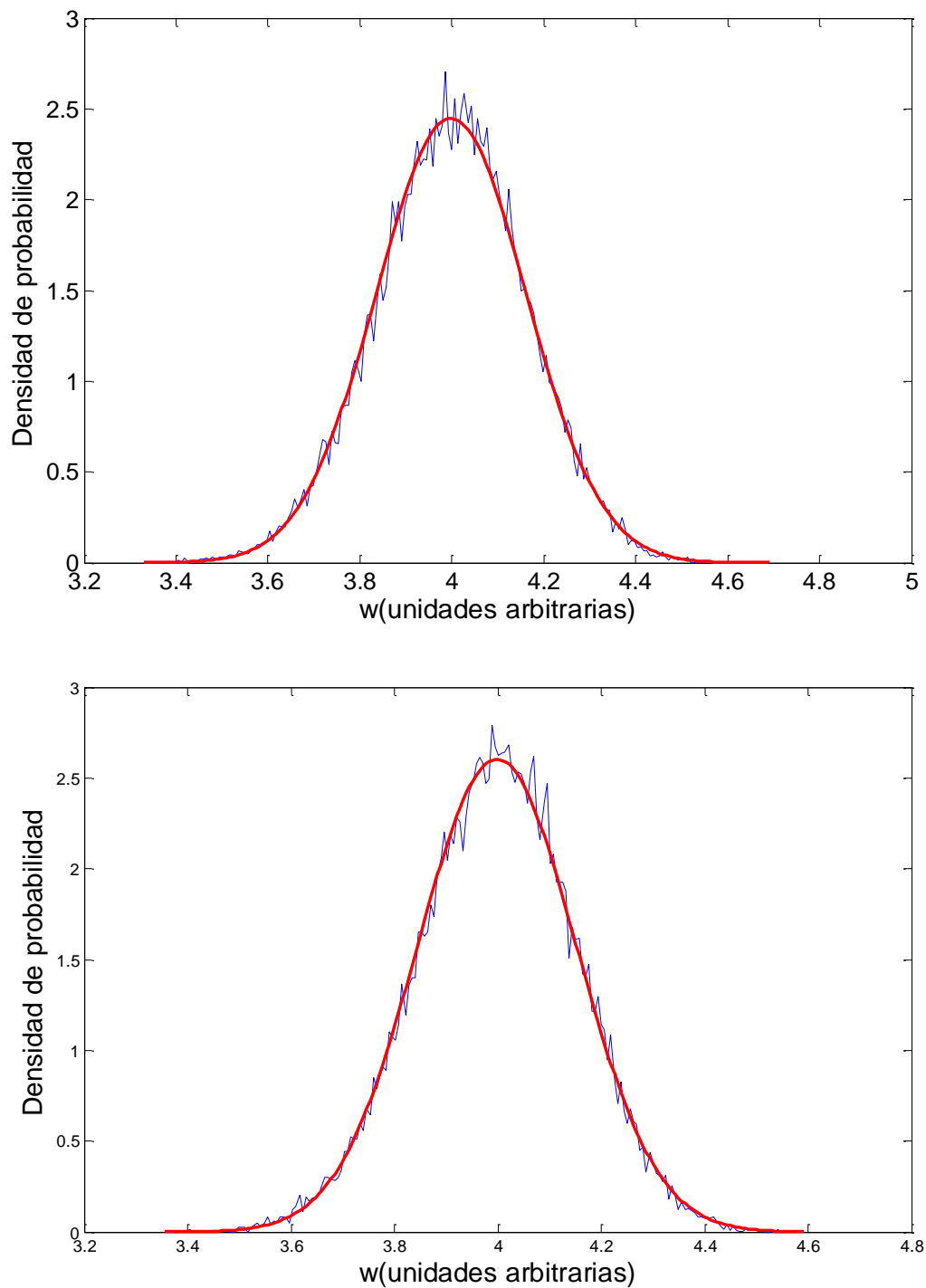


Figura 2.3: Función de densidad de probabilidad para la frecuencia de oscilación. La línea continua en rojo representa el valor calculado a través de la aproximación de la ecuación (21). En azul el histograma experimental. $\sigma_K=0.1, \sigma_\mu=0.3$ y $\rho=0.1$ (arriba), -0.1 (abajo). $W_0=4$ en ambos casos.

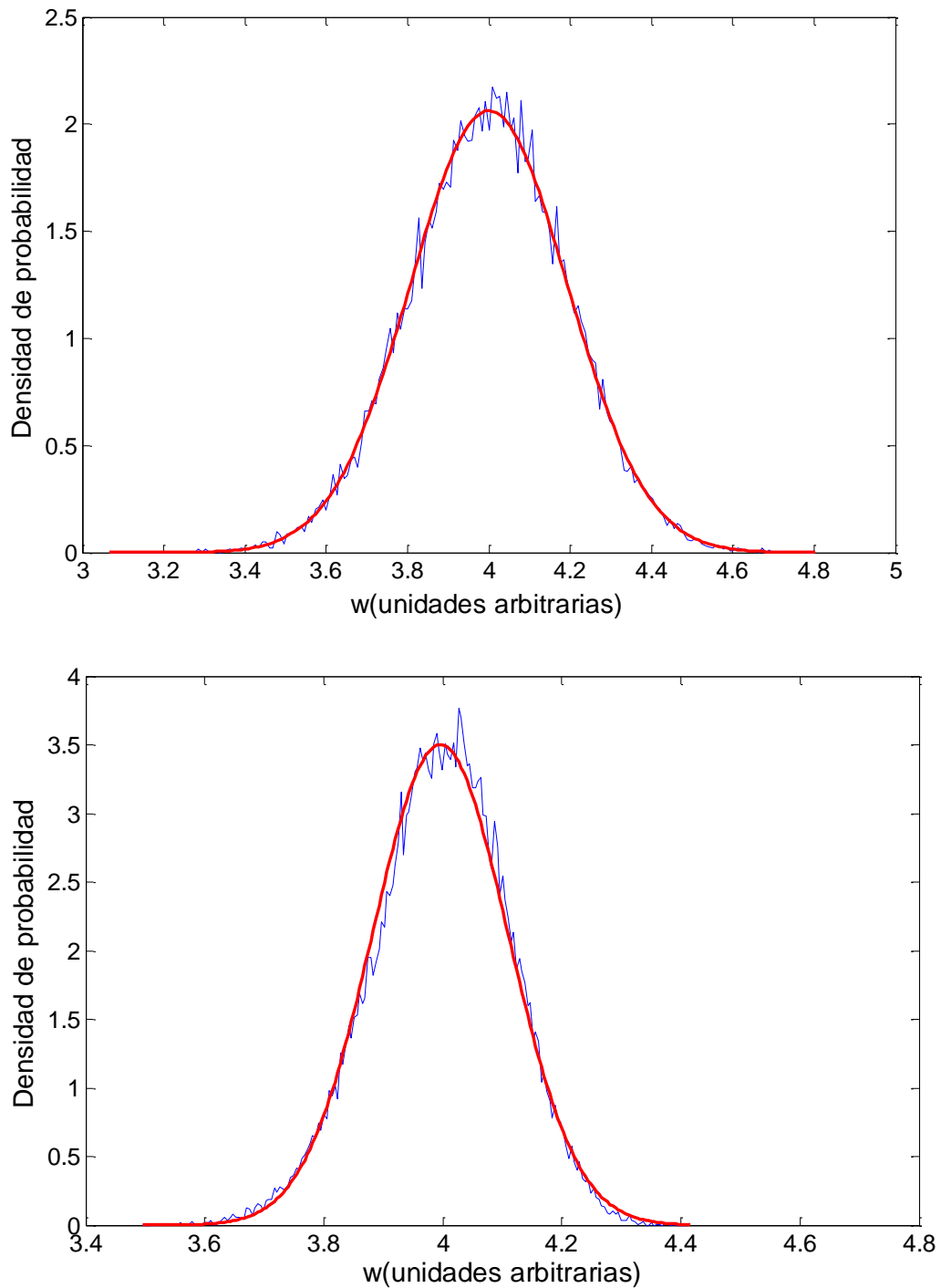


Figura 2.4: Función de densidad de probabilidad para la frecuencia de oscilación. La línea continua en rojo representa el valor calculado a través de la aproximación de la ecuación (21). En azul el histograma experimental. $\sigma_K=0.1, \sigma_\mu=0.3$ y $\rho=0.8$ (arriba), -0.8 (abajo). $W_0=4$ en ambos casos. A diferencia del caso anterior, ahora hay una ligera diferencia, aunque pequeña, entre los dos tipos de curva.

2.4 Hamiltonianos puramente estocásticos

En las secciones anteriores el Hamiltoniano considerado era aleatorio en el sentido de que las constantes que aparecían en su definición (K y μ) no estaban definidas de antemano sino que seguían una cierta distribución conjunta de probabilidad. En sentido estricto no se trabaja pues con un solo Hamiltoniano, sino con un conjunto de ellos. Tiene sentido entonces preguntar cuál es la “curva solución típica” de dicho conjunto. Para ello calculamos la media de todas las posibles soluciones, llegando a la conclusión de que esta solución media no se corresponde con la solución del Hamiltoniano medio o más probable, sino que describe una solución disipativa dónde la frecuencia de oscilación cambia respecto de la oscilación media del Hamiltoniano en un factor que depende de la correlación entre las variables K y μ . Esta correlación también es responsable de la mayor parte de los términos disipativos.

Estos resultados nos llevan a considerar otro tipo de aleatoriedad sobre el espacio de fases con unas propiedades mejores respecto de la solución media. Sería deseable que la solución media tuviera una correspondencia con la solución que proviene del Hamiltoniano medio. Por otro lado, también sería deseable que la aleatoriedad fuera “intrínseca”. Por este término designamos la propiedad de que se la propia dinámica de evolución la que sea aleatoria y no se introduzca por una falta de conocimiento sobre qué Hamiltoniano en concreto está gobernando la evolución.

La manera más sencilla de introducir las anteriores propiedades es considerar el Hamiltoniano como estocástico, dónde las variables $\Delta\mu$ y ΔK son ahora variables aleatorias que toman valores distintos en función del tiempo, $\Delta\mu_t$, ΔK_t . Aplicando estas consideraciones a los Hamiltonianos cuadráticos en q y p que hemos utilizado hasta ahora, las ecuaciones de Hamilton darían, para las variaciones de q y p :

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \mu_0 p + \Delta\mu_t p \\ \dot{p} &= -K_0 q - \Delta K_t q \end{aligned} \tag{2.27}$$

El problema es cómo interpretar ahora estas ecuaciones, ya que la parte de las variables aleatorias son claramente no derivables respecto al tiempo. Las ecuaciones (2.27) son ecuaciones estocásticas. Normalmente, para una ecuación diferencial, tanto su forma habitual en forma de diferenciales como su forma integral son equivalentes. Para una ecuación estocástica ambas formulaciones no lo son, ya que, normalmente, la forma diferencial no tiene sentido, como es este caso. Si las transformamos a su forma integral:

$$\begin{aligned}
q_t - q_0 &= \int_0^t \mu_0 p_t dt + \int_0^t p_t \Delta \mu_t dt = \int_0^t \mu_0 p_t dt + \int_0^t p_t dB_\mu \\
p_t - p_0 &= \int_0^t -K_0 q_t dt - \int_0^t q_t \Delta K_t dt = \int_0^t -K_0 q_t dt - \int_0^t q_t dB_K
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Dónde se han utilizado las siguientes consideraciones a la hora de entender cómo calcular estas ecuaciones [Martínez 2003]:

- Los productos $\Delta \mu_t dt$ e $\Delta K_t dt$ definen dos procesos estocásticos Brownianos dB_μ y dB_K dado que $\Delta \mu_t$ e ΔK_t se definen como variables normales de media cero y varianza σ_μ y σ_K para todo t.
- En este sentido, las segundas integrales que aparecen en las ecuaciones (2.28) deben ser interpretadas como integrales de Itô, perfectamente definidas para procesos Brownianos como los considerados.
- Finalmente, los dos procesos dB_μ y dB_K no son independientes ya que las variables que $\Delta \mu_t$ e ΔK_t tienen matriz de covarianzas no nulas igual para todo t.
- Las variables q y p son ahora no funciones, sino procesos estocásticos solución de las ecuaciones (2.28).

Con las anteriores puntualizaciones es corriente escribir en forma simbólica las ecuaciones (2.28) como:

$$\begin{aligned}
dq &= \mu_0 p dt + p dB_\mu \\
dp &= -K_0 q dt - q dB_K
\end{aligned} \tag{2.29}$$

En lugar de escribir estas ecuaciones en función de los procesos Brownianos dB_μ y dB_K , es mejor escribirlas en función de dos procesos de Wiener estándar de media cero y varianza unidad, dW_μ , dW_K con una correlación nula entre ellos. En función de procesos los dB_μ y dB_K originales pueden escribirse como:

$$\begin{pmatrix} dB_\mu \\ dB_K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_\mu & 0 \\ \sigma_K \rho & \sigma_K \sqrt{1-\rho^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dW_\mu \\ dW_K \end{pmatrix} \tag{2.30}$$

Es fácil comprobar que, con esta reescritura, los procesos originales mantienen su varianza y covarianza en el mismo punto “t”.

$$\begin{aligned}
E[dB_\mu^2] &= \sigma_\mu^2 dt \\
E[dB_K^2] &= \sigma_K^2 \rho^2 + \sigma_K^2 (1-\rho^2) = \sigma_K^2 dt \\
E[dB_\mu dB_K] &= \sigma_\mu \sigma_K \rho E[dW_\mu^2] + \sigma_\mu \sigma_K \sqrt{1-\rho^2} E[dW_\mu dW_K] = \sigma_\mu \sigma_K \rho dt = C_{\mu K} dt
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Las ecuaciones (2.29) definen en realidad un proceso estocástico vectorial. Para diferenciar este proceso del vector $u=(q,p)$ que hemos utilizado para denotar una posición sobre el espacio de fases vamos a denotarlo por $U=(q,p_t)$. Con esta notación, he introduciendo los nuevos procesos definidos por (2.30), las ecuaciones pueden escribirse como:

$$\begin{aligned}
 dU &= \begin{pmatrix} 0 & \mu_0 \\ -K_0 & 0 \end{pmatrix} U dt + \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & -q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dB_\mu \\ dB_K \end{pmatrix} \\
 &\Downarrow \\
 dU &= \begin{pmatrix} 0 & \mu_0 \\ -K_0 & 0 \end{pmatrix} U dt + \begin{pmatrix} 0 & \sigma_\mu \\ -\sigma_K \rho & 0 \end{pmatrix} U dW_\mu + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\sigma_K \sqrt{1-\rho^2} & 0 \end{pmatrix} U dW_K \quad (2.32) \\
 &\Downarrow \\
 dU &= A_0 U dt + B^\mu U dW_\mu + B^K U dW_K
 \end{aligned}$$

donde el valor de las matrices A_0, B^μ, B^K se desprende fácilmente de la comparación entre las dos últimas formas de la ecuación (2.32). Esta última ecuación estocástica vectorial es del tipo general,

$$dX_t = \{A(t)X_t + a(t)\}dt + \sum_{j=1}^m \{B^j(t)X_t + b^j(t)\}dW_j \quad (2.33)$$

siendo X_t un proceso estocástico vectorial de dimensión m , $A(t)$, $B^j(t)$, matrices $m \times m$ y $a(t)$ y $b(t)$ vectores de dimensión m . Si comparamos (2.33) con (2.32) veremos que, en nuestro caso, los vectores $a(t)$ y $b(t)$ son cero. A pesar de su aparente simplicidad y, a diferencia de lo que ocurre en el caso escalar, la ecuación estocástica (2.33) no admite una solución analítica a menos que todas las matrices A, B que aparecen en ella sean constantes y conmuten entre sí [Cyganowski 2001], [Kloeden 1992], quedando como alternativa su resolución numérica. Este es el caso que nos ocupa, ya que, aunque las matrices involucradas en (2.32) son constantes, no conmutan entre sí.

Sin embargo, sí que puede darse una solución explícita para los momentos $E[X_t] = m$, $E[X_t X_t^T] = P$. Esto es, para el valor medio del proceso y su matriz de covarianzas [Cyganowski 2001]. Teniendo en cuenta que $a(t)$ y $b(t)$ son cero, la media y la matriz de segundos momentos del proceso cumple las siguientes ecuaciones diferenciales [Cyganowski 2001]:

$$\begin{aligned}\frac{dm}{dt} &= A_0 m \\ \frac{dP}{dt} &= A_0 P + P A_0^T + B^\mu P B^{\mu T} + B^K P B^{K T}\end{aligned}\tag{2.34}$$

El valor de la matriz de covarianzas, V , es, sin embargo:

$$V = E[X_t X_t^T] - E[X_t] E[X_t]^T = P - M\tag{2.35}$$

donde, según hemos definido, $m = E[X_t]$. De la primera de las ecuaciones (2.34) obtenemos que:

$$\frac{d}{dt} \{E[X_t] E[X_t]^T\} = AM + MA^T\tag{2.36}$$

Y, por tanto, la variación temporal de la matriz de covarianzas de las variables (q, p) se puede escribir como:

$$\frac{dV}{dt} = AV + VA^T + \sum_{i=\mu, K} (B^i V B^{iT} + B^i M B^{iT})\tag{2.37}$$

Antes de expresar la forma completa de la ecuación (2.37) es mejor reformular la matriz M en una notación más compacta. Volviendo de nuevo a la nomenclatura de las ecuaciones (2.32), el proceso X_t general de la ecuación (2.33) es el U de la (2.32). La primera de las ecuaciones (2.34) define pues cuál es su valor medio, \bar{U} , definido por

$$\frac{d\bar{U}}{dt} = A_0 \bar{U} \Rightarrow \bar{U} = \{e^{A_0 t}\} \bar{U}_0 = \begin{pmatrix} \cos(w_0 t) & \frac{\mu_0}{w_0} \text{sen}(w_0 t) \\ -\frac{\mu_0}{w_0} \text{sen}(w_0 t) & \cos(w_0 t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_m \\ p_m \end{pmatrix}\tag{2.38}$$

Con esta notación, la matriz M puede escribirse:

$$M = \begin{pmatrix} q_m^2 & q_m p_m \\ q_m p_m & p_m^2 \end{pmatrix}\tag{2.39}$$

Finalmente, la expresión de la derivada de la matriz de covarianzas es:

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dt} = \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \sigma_q^2 & C_{qp} \\ C_{qp} & \sigma_p^2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 2\mu_0 C_{qp} & \mu_0 \sigma_p^2 - K_0 \sigma_q^2 \\ \mu_0 \sigma_p^2 - K_0 \sigma_q^2 & -K_0 C_{qp} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_\mu^2 \sigma_p^2 & -C_{\mu K} C_{qp} \\ -C_{\mu K} C_{qp} & \sigma_K^2 \sigma_q^2 \end{pmatrix} + \dots \\ \dots + \begin{pmatrix} \sigma_\mu^2 p_m^2 & -C_{\mu K} q_m p_m \\ -C_{\mu K} q_m p_m & \sigma_K^2 q_m^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.40)$$

Ecuaciones que también pueden reescribirse en función de los tres valores independientes $\sigma_q^2, \sigma_p^2, C_{qp}$ como:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \sigma_q^2 \\ \sigma_p^2 \\ C_{qp} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_\mu^2 & 2\mu_0 \\ \sigma_K^2 & 0 & -2K_0 \\ -K_0 & \mu_0 & -C_{\mu K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_q^2 \\ \sigma_p^2 \\ C_{qp} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_\mu^2 p_m^2 \\ \sigma_K^2 q_m^2 \\ -C_{\mu K} q_m p_m \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

En este punto, merece la pena detenerse en varias consideraciones que surgen a partir de (2.40) y (2.41).

- En primer lugar, estas dos ecuaciones nos revelan que definir un punto $u=(q,p)$ no tiene mucho sentido, ya que, al ser U un proceso estocástico, en realidad sólo podemos hablar en propiedad sobre valores medios tomados sobre sus realizaciones, esto es, del valor medio de la posición y del valor de la varianza en cada una de esas posiciones. Esto hace que, de las dos partes de (2.41) la que se corresponde con los valores medios de la posición (q_m, p_m) sea la más “importante”.
- Esta parte no es sólo la más fácilmente atribuible de sentido físico, sino que puede dársele otro valor. Las posiciones medias sobre el espacio de fases cambian con el tiempo según las ecuaciones (2.38) que describen el movimiento cuando el valor de aleatoriedad es nulo (esta era una de las propiedades interesantes que mencionábamos al comienzo de esta sección). Tomando sólo esta parte, está claro que las varianzas y covarianzas de las posiciones en (q,p) también son funciones del tiempo, produciendo una difusión sobre el espacio de fases. En este sentido podríamos decir que la dinámica expuesta en esta sección sería descrita como la de un movimiento Browniano sobre un espacio simpléctico.
- ¿Cuál de estas estructuras es la más importante? Si la aleatoriedad es nula, la evolución es la dada por el Hamiltoniano medio, cuyas curvas integrales son aquellas cuyos vectores tangentes vienen dados por la diferencial de ese Hamiltoniano medio. En este sentido, domina la estructura simpléctica del espacio de fases. Pero si la aleatoriedad es muy alta, el valor medio de la posición sobre el espacio de fases no será de gran interés frente a la difusión provocada por los términos de varianzas y covarianzas (ver ecuaciones (2.40) y (2.41)) y las curvas que describen

la evolución dinámica sobre el espacio de fases serán prácticamente irreconocibles.

- El mayor interés será cuando las curvas solución sean todavía parecidas o reconocibles como cercanas a las curvas solución del Hamiltoniano medio. Este régimen es el régimen de aleatoriedad pequeña, en el que los términos $\sigma_\mu/\mu_0, \sigma_K/K_0, \sigma_\mu\sigma_K\rho/\mu_0K_0$ son pequeños.

2.4.1 Resolución numérica de las ecuaciones

Dada la no existencia de solución analítica para las ecuaciones estocásticas integrales (2.32) que describen el problema bajo estudio, se ha realizado una implementación numérica de las mismas teniendo en cuenta las especiales características de las mismas en cuanto a la presencia de términos aleatorios. Teniendo en cuenta (2.30) y (2.31), la versión discretizada de las ecuaciones (2.32) resulta [Cyganowski 2001]:

$$\begin{aligned} q_{t+1} &= q_t + \mu_0 p_t \Delta t + \sigma_\mu p_t \sqrt{\Delta t} N_1 \\ p_{t+1} &= p_t - K_0 q_t \Delta t - \sigma_K \rho q_t \sqrt{\Delta t} N_1 - q_t \sigma_K \sqrt{1 - \rho^2} \sqrt{\Delta t} N_2 \end{aligned} \quad (2.42)$$

donde $N_{i=1,2}$ son dos variables normales independientes de media cero y varianza unidad. Introduciendo un valor inicial en las anteriores ecuaciones podemos simular la dinámica del sistema.

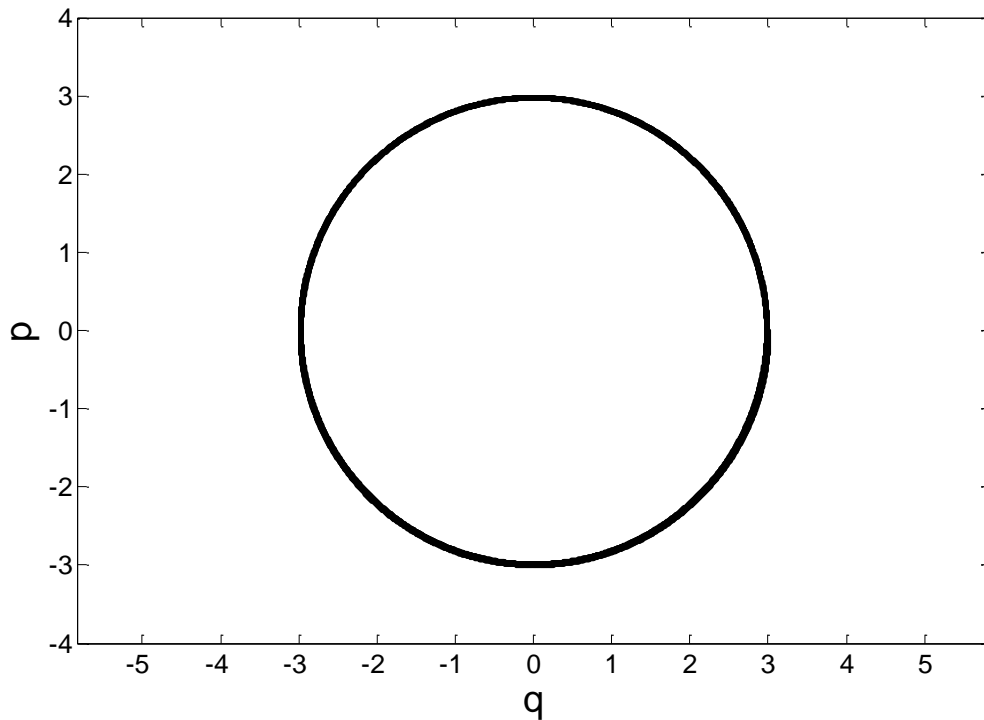


Figura 2.5: Resolución numérica de las ecuaciones (42) para los parámetros de simulación siguientes, $\Delta t=0.0001, \sigma_K=0.005, \sigma_\mu=0.002, \rho=0.5, K_0=\mu_0=2; q_0=3, p_0=0$.

En la figura 2.5 aparece representada una posible trayectoria con un nivel de aleatoriedad muy bajo. La separación respecto de la trayectoria sin ruido es insignificante.

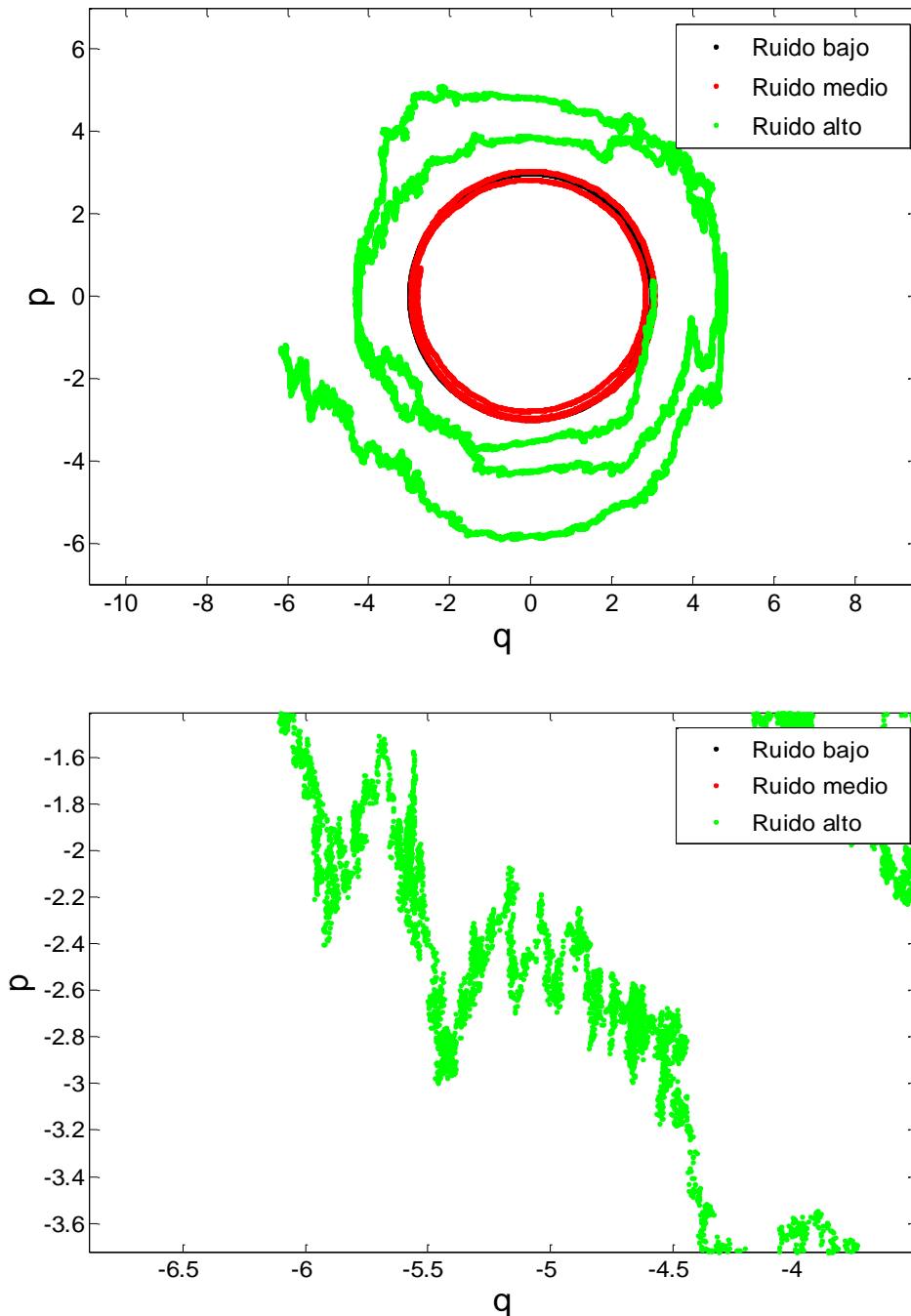


Figura 2.6: Representación de trayectorias con diferentes niveles de aleatoriedad. Nivel ruido bajo ($\sigma_K=0.005, \sigma_\mu=0.002$), ruido medio ($\sigma_K=0.05, \sigma_\mu=0.02$) y ruido alto ($\sigma_K=0.05, \sigma_\mu=0.02$). El resto de los parámetros de la simulación son los mismos que los de la figura 2.5. En la parte de arriba se representan las trayectorias, mientras que en la parte de abajo se representa una ampliación de una de las trayectorias para el caso de ruido alto.

En la figura 2.6 aparecen representadas varias trayectorias para las mismas condiciones de simulación que las de la figura 2.5, pero alterando el nivel de aleatoriedad. Vemos como, a medida que aumenta la aleatoriedad en K y μ , la trayectoria se va pareciendo más a una difusión en el espacio de fases.

También es relevante el diferente comportamiento de estas trayectorias cuando cambia la correlación entre las variables K y μ . Los resultados de las simulaciones pueden verse en las siguientes gráficas.

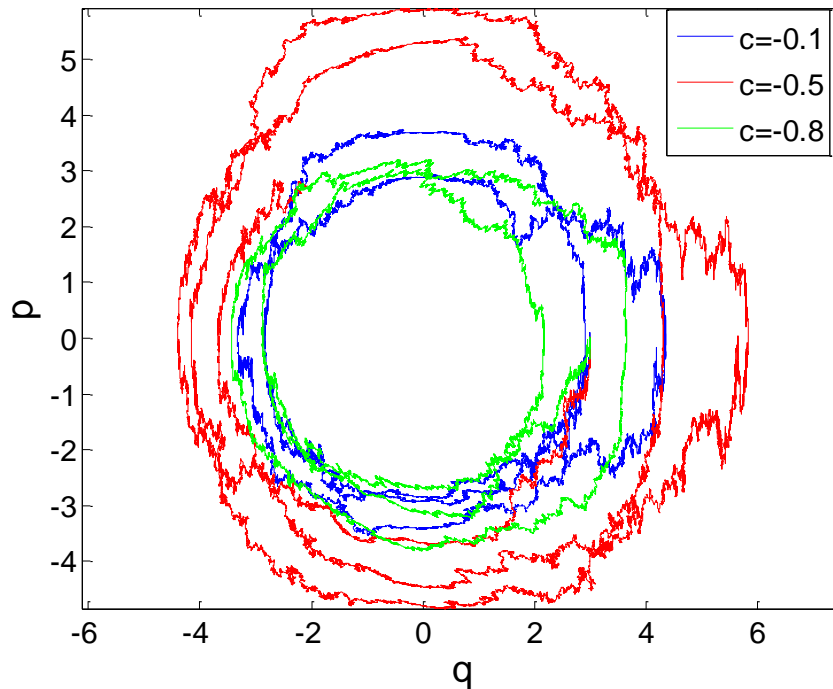


Figura 2.7: Tres trayectorias tipo para los parámetros de simulación de la figura 2.6, pero con ruido alto y correlaciones negativas entre las variables K y μ .

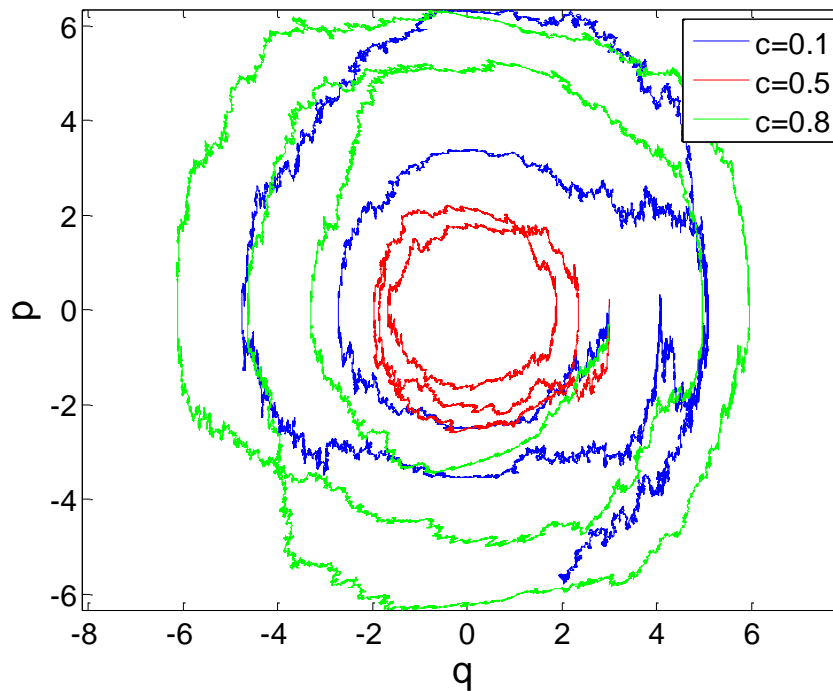


Figura 2.8: Tres trayectorias tipo para los parámetros de simulación de la figura 2.6, pero con ruido alto y correlaciones positivas entre las variables K y μ .

En las dos últimas gráficas el nivel de ruido o aleatoriedad se ha tomado como “alto” para observar el efecto de las correlaciones. Claramente afecta su valor a la forma general de la difusión y, lo que es más importante, el signo de la correlación es importante, observándose un diferente comportamiento con sólo cambiar su signo.

Este efecto no es debido solamente al nivel de ruido, alto en este caso, sino que es propio del signo de las correlaciones. Para comprobarlo se han realizado nuevas simulaciones, pero en éste caso con un nivel de ruido bajo. En este caso, aunque todas las trayectorias se parecen bastante a la trayectoria sin ruido, los efectos provocados por la existencia de correlaciones se evidencian si aumentamos la resolución gráfica de las figuras. (ver figuras 2.9 y 2.10). En la última de las figuras mencionadas (figura 2.10) aparecen los mismos efectos debidos a la correlación que los que aparecen en las figuras 2.8 y 2.9 en cuanto a qué correlación concreta tiene cada trayectoria respecto a su posición en una zona más cercana o alejada del origen de coordenadas.

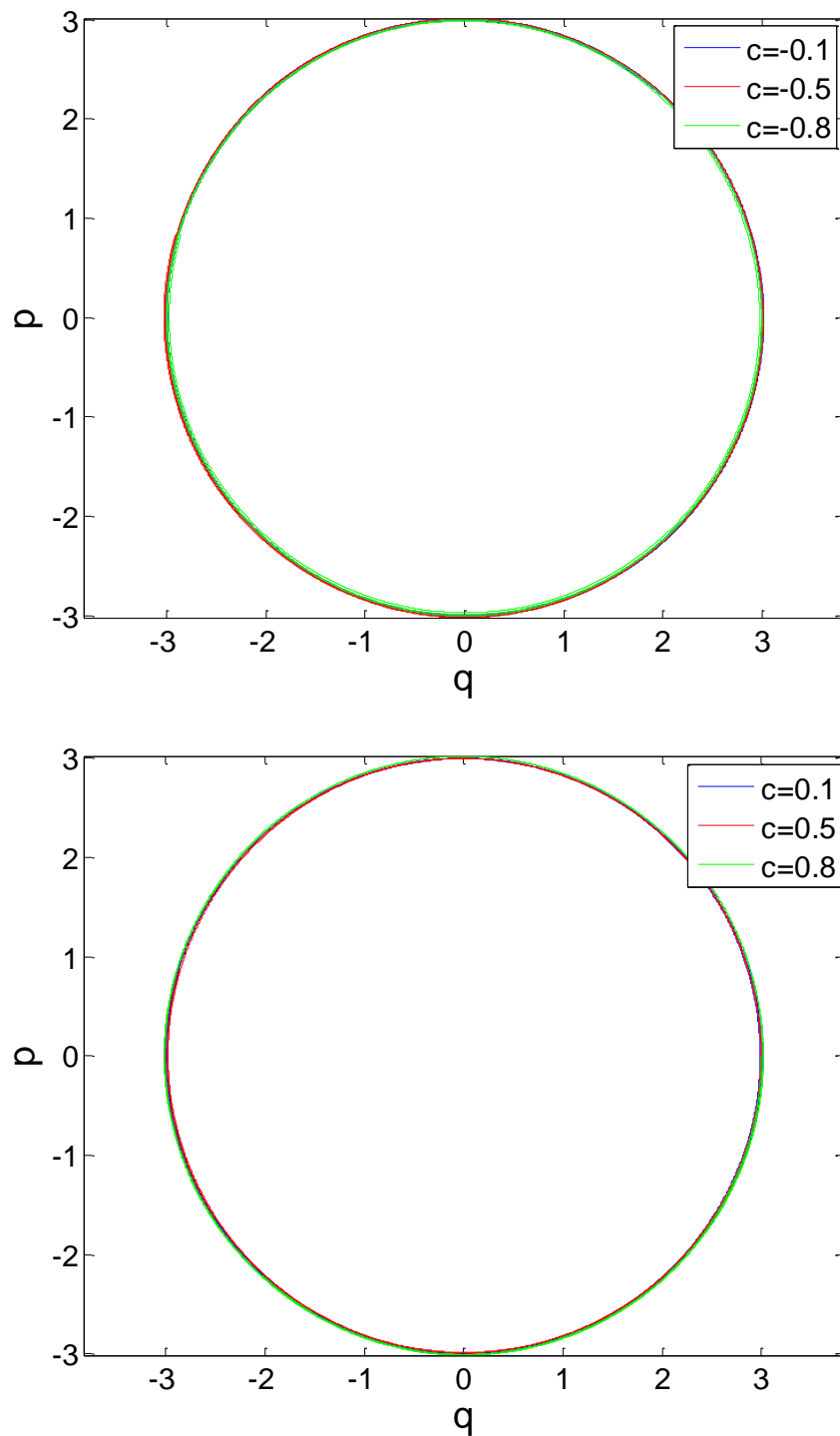


Figura 2.9: Simulación de trayectorias de bajo ruido con los mismos parámetros de simulación de la figura 2.5, pero cambiando el nivel de la correlación entre las variables K y μ . Tanto para el caso de las correlaciones positivas como negativas, las trayectorias son prácticamente iguales a las de nivel de ruido cero.

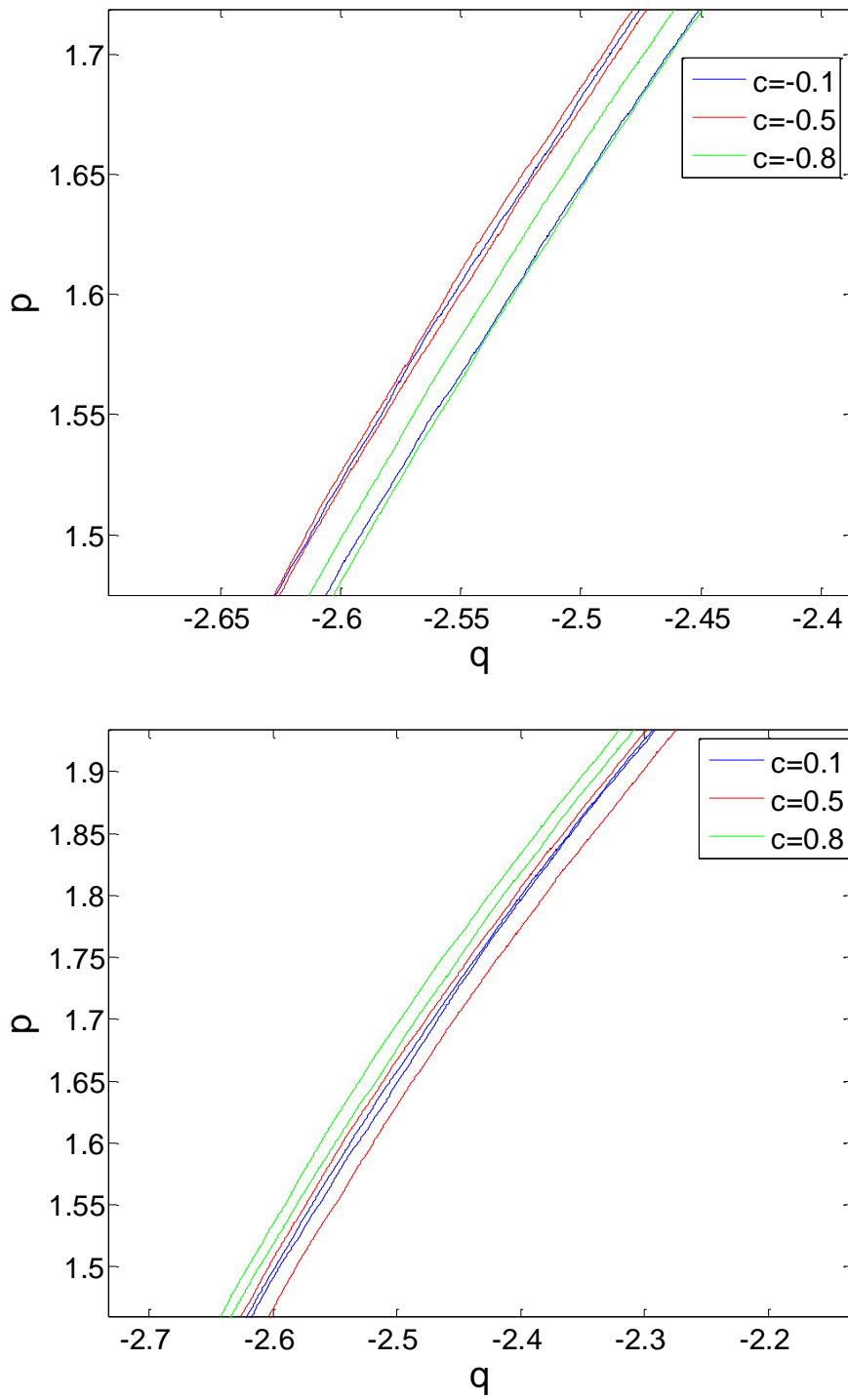


Figura 2.10: Ampliación de las gráficas de la figura 2.9. Comparar con las trayectorias de las figuras 2.8 y 2.9

Del mismo modo podemos calcular cuál es el valor de las varianzas y covarianzas de las variables $u=(q,p)$ resolviendo las anteriores ecuaciones numéricas para un conjunto de trayectorias que parten del mismo punto inicial u_0 sobre el espacio de fases. Para este conjunto de trayectorias se calcula la varianza en cada una de las variables, así como su correlación. Por comparación con las gráficas anteriores, el valor de ruido escogido se toma como medio ($\sigma_K=0.05$, $\sigma_\mu=0.02$) y los valores de la correlación $\rho=0.5$ y -0.5 .

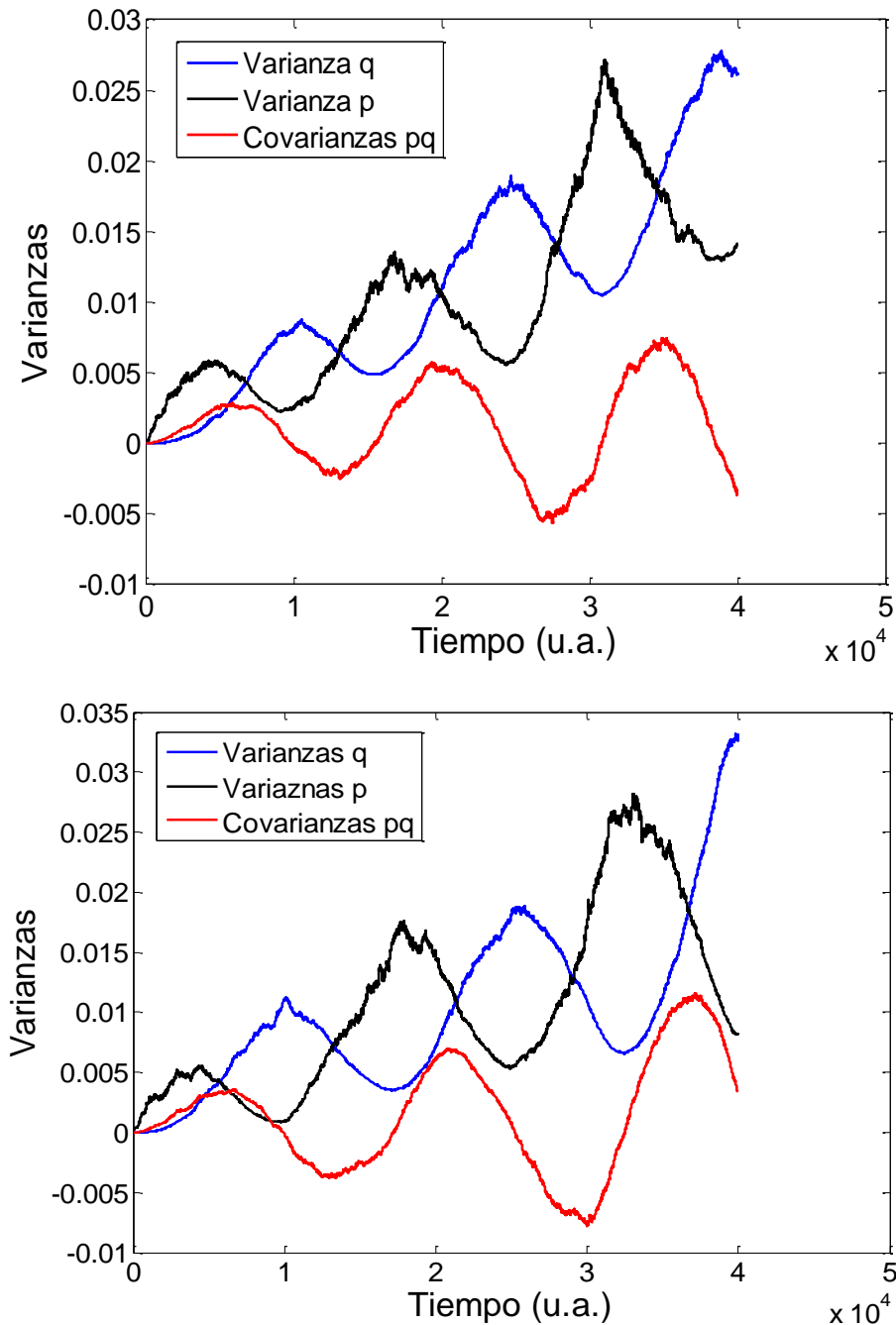


Figura 2.11: Valores de las varianzas y covarianzas entre las variables (q,p) en función del tiempo para los parámetros de simulación de la figura 2.5 con ruido medio. Arriba, correlación $\rho=-0.5$, abajo $\rho=0.5$.

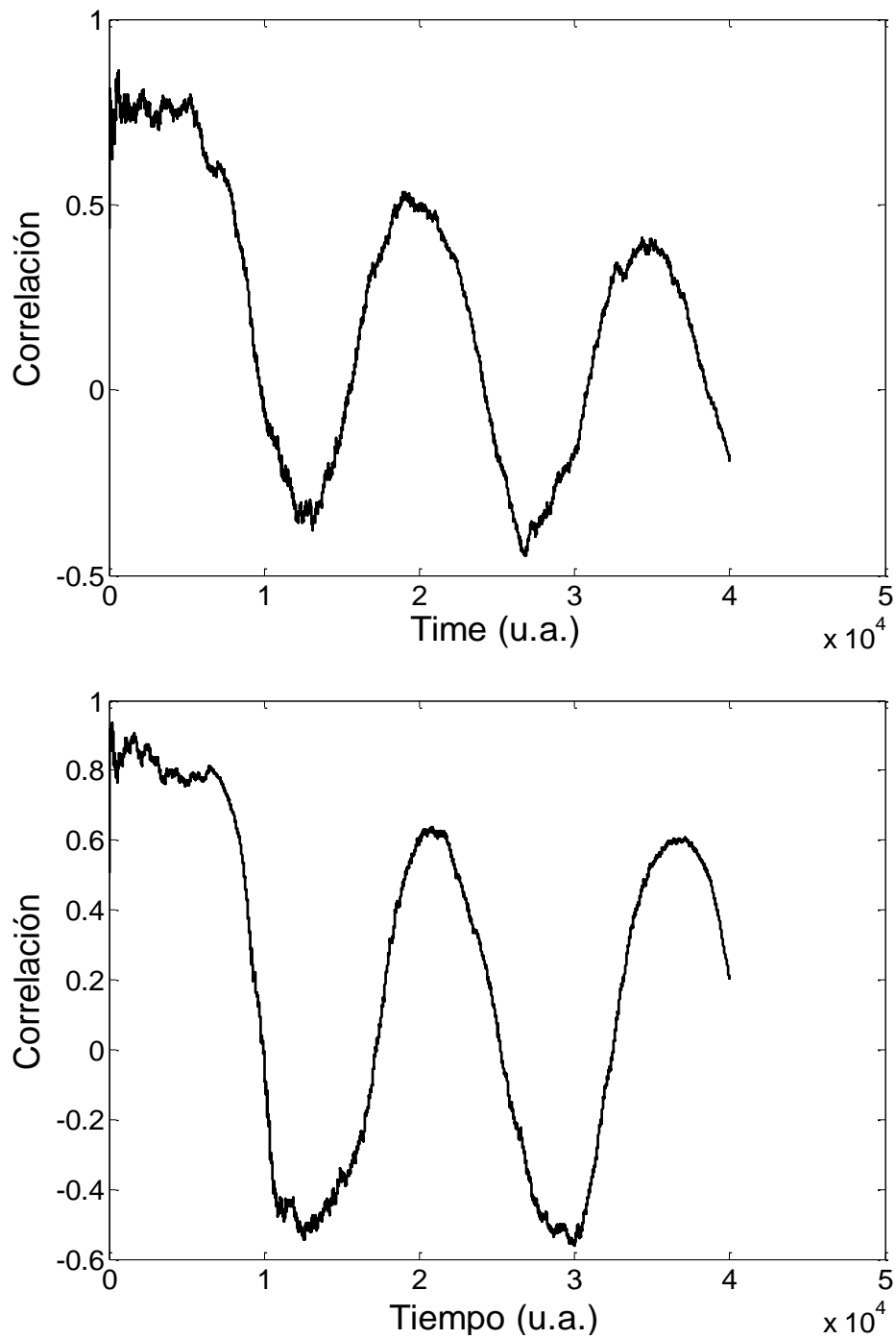


Figura 2.12: Valor de la correlación entre las variables de posición (q,p) en función del tiempo para las simulaciones de las gráficas 2.11. Arriba, $\rho=-0.5$, abajo $\rho=0.5$

2.5 Difusión de $\hat{I}t$ y dinámica aleatoria.

De las simulaciones anteriores y especialmente de las relacionadas con las expresiones (2.40) y (2.41) podemos extraer varias consideraciones. La primera es que, las varianzas de las variables de posición $u=(q,p)$ no sólo varían con el tiempo (de acuerdo con lo calculado por las expresiones (2.40) y (2.41), sino que aumentan en el tiempo, tanto en q como en p . Esto es indicativo de un proceso de difusión, dónde la variación cuadrática media de la posición aumenta con el tiempo. Si el proceso sufre un movimiento Browniano en una dimensión, dicho crecimiento es lineal en el tiempo.

En efecto, los procesos de difusión pueden caracterizarse mediante procesos estocásticos multidimensionales del tipo [Moro 1999], [Martinez2003]:

$$dX_t = \boldsymbol{\mu}(X_t, t)dt + \boldsymbol{\sigma}(X_t, t)dW_t \quad (2.43)$$

donde X_t es un proceso estocástico N-dimensional, $\boldsymbol{\mu}$ un vector de difusión of "drift" , $\boldsymbol{\sigma}$ una matriz de difusión N x N y dW_t un proceso Wiener estándar N-dimensional. Si comparamos esta representación con la de la ecuación (2.32) observaremos que el proceso que estamos describiendo puede expresarse como:

$$dU_t = \begin{pmatrix} \mu_0 p \\ -K_0 q \end{pmatrix} dt + \begin{pmatrix} \sigma_\mu p & 0 \\ -\sigma_K \rho q & -\sigma_K q \sqrt{1-\rho^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dW_t^\mu \\ dW_t^K \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

en la que se reconocen claramente los términos de la ecuación (43), vector "drift" y matriz de difusión:

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_0 p \\ -K_0 q \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_\mu p & 0 \\ -\sigma_K \rho q & -\sigma_K q \sqrt{1-\rho^2} \end{pmatrix}$$

Una manera alternativa de considerar una difusión de $\hat{I}t$ es estudiar la ecuación o ecuaciones de Fokker-Planck asociadas a la misma. Una ecuación de Fokker-Planck es una ecuación para la densidad de probabilidad de, dadas unas condiciones iniciales, la posición de la partícula sobre un punto x , en el tiempo t , sobre el espacio considerado [Referencia Fokker-Planck]. En el caso en que x denote la posición sobre un espacio N-dimensional, dicha ecuación es:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x^i} [D_i^1(x_1, \dots, x_N) f] + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x^i \partial x^j} [D_{ij}^2(x_1, \dots, x_N) f] \quad (2.46)$$

donde los términos D^1 y D^2 se suelen denominar como término de arrastre-transporte y tensor de difusión, respectivamente. La relación con la difusión general de Îto (expresada por (2.43)) es:

$$\begin{aligned} D^1 &= \boldsymbol{\mu} \\ D^2 &= \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\sigma}^T \end{aligned} \quad (2.47)$$

Si aplicamos estas ecuaciones al caso particular que estamos estudiando obtendríamos:

$$\begin{aligned} D^1 &= \begin{pmatrix} \mu_0 p \\ -K_0 q \end{pmatrix} \\ D^2 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_\mu^2 p^2 & -C_{\mu k} q p \\ -C_{\mu k} q p & \sigma_k^2 q^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.48)$$

Este tensor de difusión nos dice que el movimiento en el espacio de fases produce una variación de la dispersión media de la posición que es anisótropa y, además, dependiente del punto $u=(q,p)$ considerado. Por tanto, tiene que estar relacionado con la matriz de covarianzas entre las posiciones (q,p) en el espacio de fases que ha sido calculada previamente mediante la ecuación (2.40). Si comparamos con esta ecuación, vemos como el tensor de difusión es el último término de dV/dt en la expresión (2.40), pero particularizado para la posición media (q_m, p_m) . De ahí que el resto de las matrices que aparecen tiene que ser también interpretadas como difusiones por un razonamiento de dimensionalidad.

Resumiendo el razonamiento llevado a cabo en esta sección. La introducción de una aleatoriedad temporal en el Hamiltoniano puede ser interpretada como una difusión de Îto sobre el espacio de fases lo que lleva, vía la ecuación de Fokker-Planck, a ver la evolución de la densidad de probabilidad asociada producida por un término de transporte más un término de difusión. Este término de difusión, que proviene de la aleatoriedad en las constantes del Hamiltoniano, es el responsable de la evolución temporal de la matriz de covarianzas entre las posiciones $u=(q,p)$ en el espacio de fases.

Podemos avanzar un poco más en esta línea de pensamiento. Fijémonos en que la ecuación (2.46) no está escrita en una forma covariante. Esto es debido a la peculiaridad del cálculo de Îto, donde, en los desarrollos de Taylor de funciones que dependen de procesos estocásticos, debemos incluir, como primer orden en dt , los términos de segundo orden, hessiano, del desarrollo de la función, ya que estos, al contener los términos de ruido, tienen varianzas proporcionales a dt [Martinez 2003]. La ecuación de Fokker-Planck anterior puede reescribirse como

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x^i} \mu^i f + \frac{\partial^2}{\partial x^i \partial x^j} D^{2i,j} f \quad (2.49)$$

¿Cómo se comporta esta ecuación frente a un cambio de coordenadas? Por las consideraciones del párrafo anterior está claro que la condición no es obvia, dado el cambio en la expresión de las diferenciales de una función que exige el cálculo de $\hat{\mu}$. Supongamos que el espacio de fases está provisto de un tensor métrico que puede provenir de la expresión de la métrica cartesiana estándar en otro sistema de coordenadas. Denotando como $G = \det(g_{ij})$, siendo g_{ij} el tensor métrico mencionado, la ecuación (2.49) puede escribirse en forma tensorial como [Fredkin 2001]:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial x^i} (\sqrt{G} \hat{\mu}^i F) + \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\sqrt{G} D^{2i,j} \frac{\partial F}{\partial x^j} \right) \quad (2.50)$$

donde aparece la densidad $F = f / \sqrt{G}$ y un nuevo término de arrastre $\hat{\mu}$ definido por [Fredkin 2001]:

$$\hat{\mu}^i = \mu^i - \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial x^j} \sqrt{G} D^{2i,j} \quad (2.51)$$

En la ecuaciones (2.50) y (2.51) siguen apareciendo claramente discernibles los términos de transporte y el de difusión. Sin embargo, esta forma covariante de la ecuación de Fokker Planck permite establecer un reinterpretación de la misma.

Supongamos que, en lugar de la difusión Browniana considerada aquí, hubiésemos considerado una difusión isótropa y con varianza unidad (procesos de Wiener estándar). La parte asociada al tensor de difusión en (2.46) sería simplemente la actuación del operador Laplaciano $1/2\Delta$. Si, en lugar de producirse la difusión sobre un espacio de fases plano, lo consideramos sobre una variedad de tensor métrico g_{ij} , el operador asociado sería el asociado al operador de Laplace-Beltrami $1/2\Delta_{LB}$, siendo este último operador:

$$\Delta_{LB} = \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\sqrt{G} g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^j} \right) \quad (2.52)$$

y donde g^{ij} denota el inverso del tensor métrico. A la vista de este operador surge la siguiente pregunta. ¿Sería posible ver la matriz de difusión como la inversa de un tensor métrico? Si fuese así, según los razonamientos anteriores, la difusión sobre el espacio de fases que hemos estado estudiando hasta ahora podría verse como una difusión estándar sobre un espacio de fases que estaría dotado de una métrica. Sobre dicho espacio, el valor de transporte también cambia introduciendo un término adicional debido a la métrica dado por (2.51). A la posible definición y significado de este tensor métrico vamos a dedicar el siguiente capítulo.

3. Métricas sobre el espacio de fases

En el apartado anterior se expuso como introducir aleatoriedad sobre el espacio de fases de un sistema. Las opciones son varias. Sin embargo, si exigimos que las ecuaciones del movimiento del sistema sin aleatoriedad sigan siendo las mismas que las ecuaciones medias del sistema con aleatoriedad, las posibilidades se restringen.

Una opción ha sido la definición de movimientos Brownianos sobre el espacio de fases. Para seguir manteniendo una interpretación física estos movimientos reflejan la aleatoriedad en las constantes que caracterizan al sistema físico bajo estudio y que se introducen en el Hamiltoniano del mismo. En el caso del capítulo anterior, estas constantes eran la masa reducida y la constante de recuperación de un oscilador armónico. A fin de utilizar la teoría de movimientos Brownianos tipo Wiener, estas constantes eran vistas como variables aleatorias gaussianas con correlación entre ellas.

En la parte final del capítulo anterior se llegaba a la formulación covariante de dicho movimiento Browniano sobre el espacio de fases, dónde se explicitaba una métrica sobre el mismo. En este capítulo se estudiará la relación entre el tensor de difusión y la posibilidad de definición de una métrica en el espacio de fases. Tal posibilidad sugiere ver la evolución de la densidad de probabilidad sobre el espacio de fases como una evolución sobre una variedad con un tensor métrico que venga dictado por el tensor de difusión físico.

3.1 Vectores y variables aleatorias multidimensionales.

En el capítulo anterior hemos visto como se puede definir sobre el espacio de fases de un sistema físico un movimiento Browniano multidimensional. En el caso específico que examinamos, este movimiento Browniano se realizaba sobre una variedad simpléctica bidimensional y con una correlación entre los movimientos brownianos definidos. Matemáticamente, las ecuaciones de movimiento daban lugar a una ecuación diferencial estocástica de Itô dada por [Moro 1999]:

$$dU_t = \boldsymbol{\mu}dt + \boldsymbol{\sigma}d\mathbf{W} \quad (3.1)$$

donde $\boldsymbol{\mu}$ era el término que en la ecuación de Fokker Planck producía el transporte y $\boldsymbol{\sigma}$ una matriz que controla las covarianzas entre los procesos de Wiener estándar englobados en el vector $d\mathbf{W}$.

Si no existiese ningún tipo de aleatoriedad las ecuaciones (3.1) vendrían dadas por:

$$dU_t = \boldsymbol{\mu}dt \Rightarrow \frac{dU_t}{dt} = \boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = V_0 \quad (3.2)$$

donde V_0 es el campo vectorial asociado a la curva solución del Hamiltoniano sin aleatoriedad (recordemos aquí que las ecuaciones (3.1) se han calculado partiendo de la solución de las ecuaciones de Hamilton). En el caso del oscilador armónico que hemos estudiado en el capítulo anterior este término de arrastre es:

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_0 p \\ -K_0 q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mu_0 \\ -K_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = A_0 u \quad (3.3)$$

Formalmente, podemos transformar la ecuación integral (3.1) en una ecuación diferencial como:

$$\frac{dU_t}{dt} = V = V_0 + \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\xi} = V_0 + \Delta V \quad (3.4)$$

siendo $\boldsymbol{\xi}$ un vector aleatorio de media cero y con matriz de covarianzas la matriz identidad. Dicha expresión debe entenderse como formal, entendiéndose siempre como una ecuación integral de Itô dada por (3.1). Sin embargo, vista desde otro punto de vista la anterior ecuación integral admite una interpretación más interesante en términos de campos vectoriales.

Efectivamente, las ecuaciones de Hamilton determinan un campo vectorial a través de la diferencial de la función Hamiltoniana. El flujo asociado a dicho campo vectorial proporciona las curvas solución en función del tiempo. O, lo que es lo mismo, las

ecuaciones de Hamilton determinan un campo vectorial que, en cada punto del espacio de fases, es tangente a la curva solución que pasa por dicho punto.

La ecuación (3.4) nos da esta información, pero incluyendo ahora el efecto de la aleatoriedad. Las ecuaciones de Hamilton aleatorias que estamos tratando no producen un campo vectorial, sino un campo vectorial aleatorio. Esto es, en cada punto del espacio de fases no tengo definido un vector, sino un conjunto de ellos dado por (3.4), dependiendo del valor concreto de las variables aleatorias ξ . En este sentido, el campo vectorial es considerado como un campo vectorial aleatorio. Esta es la otra forma de ver las ecuaciones integrales (3.1).

¿Cómo podemos tratar a ese campo vectorial aleatorio? La propuesta más interesante surge de interpretar dicho vector como una variable aleatoria multidimensional. (Si lo aplicamos a los casos del capítulo anterior, esta variable aleatoria es bidimensional). Como tal variable aleatoria, tendrá un valor medio y una matriz de varianzas y covarianzas. El valor medio se corresponde con V_0 y la matriz de covarianzas Σ viene dada por:

$$\Sigma = \mathbf{E}[(V - V_0)(V - V_0)^T] = \sigma\sigma^T = S_{\Delta V} \quad (3.5)$$

que es $2D^2$, el doble del tensor de difusión según se ha definido previamente.

Llegamos así a un importante resultado como es el siguiente: **un Hamiltoniano aleatorio determina sobre el espacio de fases, a través de las ecuaciones de Hamilton, un campo vectorial aleatorio cuyo valor medio viene determinado por el campo asociado al Hamiltoniano sin aleatoriedad, mientras que las covarianzas de las componentes de dicho campo determinan un tensor de difusión sobre el espacio de fases.** Ese tensor de difusión está relacionado con la matriz de covarianzas entre las componentes del vector aleatorio.

La anterior relación entre matriz de covarianzas y difusión nos permite dar una interpretación física a la ecuación (3.5). Efectivamente, dado un vector unitario en una determinada dirección, u_θ , la varianza en esa dirección viene dada por [Morrison 1990]:

$$u_\theta^T \Sigma u_\theta \quad (3.6).$$

En virtud de lo anterior, dicha cantidad representa físicamente el coeficiente de difusión en esa determinada dirección del espacio de fases en el punto dónde se ha calculado Σ .

La definición de la matriz de covarianzas permite definir una métrica o distancia denominada distancia de Mahalanobis en honor al estadístico que potenció su desarrollo. Dicha métrica viene definida por la relación siguiente [Morrison 1990],[Peña 1991],[López-Alonso 2002] :

$$d_M^2 = (V_2 - V_1)^T \Sigma^{-1} (V_2 - V_1) \quad (3.7)$$

donde V_1 y V_2 son realizaciones del campo vectorial aleatorio en el punto en el que se ha calculado Σ . ¿Cuál es el significado de la distancia de Mahalanobis? Veamos primero un ejemplo en una sola dimensión.

- Supongamos que tenemos una variable aleatoria x de media x_0 y varianza σ^2 . Una medida de la dispersión sería medir la diferencia respecto a la media $(x-x_0)$. Sin embargo, una mejor idea sobre la dispersión nos la da esa distancia comparada con la "dispersión media esperada", esto es, con el valor de la varianza σ^2 . Así que una mejor medida sería $(x-x_0)^2/\sigma^2$. Según la definición anterior (3.7) este valor es el cuadrado de la distancia de Mahalanobis entre la observación "x" de la variable y su valor medio, $d_M^2(x, x_0)$.
- En el caso de una variable aleatoria N-dimensional el anterior planteamiento puede realizarse, pero ahora tendremos diferentes valores de dispersión en diferentes direcciones, dados por el valor de (3.6). Para verlo más claramente a través de un ejemplo, vamos a considerar la variable aleatoria vectorial siguiente $x=(x(1),x(2))$ donde $x(1)$ y $x(2)$ son dos variables aleatorias de varianza σ_1 y σ_2 correlación ρ y media cero. En la figura 3.1 aparece una representación de dichas variables para un muestreo de 1000 puntos.

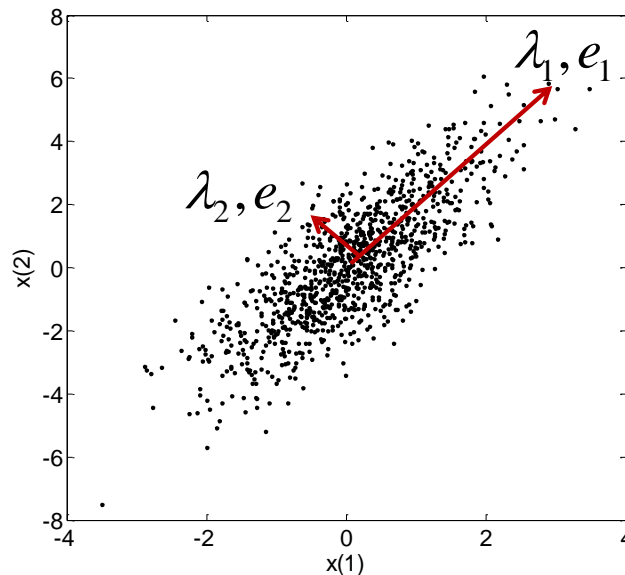


Figura 3.1: Vista de la distribución de una variable aleatoria bidimensional con matriz de covarianzas $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1.6 & 1.2 \end{bmatrix}$. En rojo aparecen las direcciones principales (e_1, e_2) con una longitud proporcional a la varianza en esa dirección (λ_1, λ_2).

La correlación introducida para el caso de la figura 3.1 es de 0.8 y puede observarse como las dos variables $x(1)$ y $x(2)$ tienen una alta relación lineal entre ellas. En esa misma figura se muestran dos estructuras esenciales que acompañan al tratamiento de la matriz de covarianzas de una variable aleatoria vectorial como son las direcciones principales y los autovalores.

Las direcciones principales son un nuevo sistema de referencia respecto del cual las variables que forman la variable vectorial muestran una correlación cero. A lo largo de ellas, la dispersión es máxima (ver en la figura los valores (e_1, e_2) y (λ_1, λ_2)). Matemáticamente la anterior aseveración supone diagonalizar la matriz de covarianzas de tal modo que esta puede escribirse como (la matriz de covarianzas es simétrica y definida positiva):

$$\Sigma = \sum_{i=1}^N \lambda_i (e_i e_i^T) \quad (3.8)$$

siendo λ_i los autovalores y e_i los autovectores asociados de la matriz de covarianzas. De la expresión (3.8) y de la ortonormalidad del conjunto de autovectores surge la interpretación de los autovalores como la varianza a lo largo de la dirección marcada por el autovector correspondiente [Morrison 1990],[López-Alonso 2002].

Si la variable original $x=(x^1, x^2, \dots, x^N)$ se expresa en la base producida por los autovectores de la matriz de covarianzas $(Y_\beta^{i=1, \dots, N})$ y, sin falta de generalidad suponemos que la media de esta variable aleatoria vectorial es el vector cero, la distancia de Mahalanobis para una realización concreta de la variable sería [Peña 1991]:

$$d_M^2(x_\beta, 0) = \sum_{i=1}^N \frac{Y_\beta^i}{\lambda_i} \quad (3.9)$$

Y dado que este número es un escalar, su valor debe ser el mismo en cualquier base que escojamos para describirlo. A la base en las que obtenemos la expresión (3.9) se le suele denominar en probabilidad y estadística base de componentes principales [Morrison 1990]. En esa base puede verse claramente que la distancia de Mahalanobis mide la distancia euclídea entre dos puntos, pero utilizando una escala diferente en cada eje. La escala es aquella que representa el valor de "dispersión medio" (la varianza) sobre ese eje o dirección.

Esta distancia ha demostrado su utilidad como medida de referencia en múltiples contextos, especialmente en aquellos en los que las variables involucradas mantienen entre sí diferentes grados de correlación y dispersión. Si ahora expresamos (3.9) en cualquier otra base, obtenemos la expresión general (3.7) para la distancia o métrica de Mahalanobis.

Esta métrica tiene varias propiedades interesantes:

1) Si las variables aleatorias de base son gaussianas, la expresión (3.9) reescribe d_M^2 como una suma de N cuadrados de variables gaussianas de media cero y varianza unidad (ya que cada una aparece dividida por su varianza λ_i). Si ahora tomamos diferentes muestras de la variable original, podemos preguntarnos si las distancias a la media siguen alguna distribución de probabilidad. Con las hipótesis anteriores, d_M^2 sigue una distribución χ_N^2 de N-grados de libertad [Peña 1991], cuya función de densidad de probabilidad es:

$$f(x, N) = \begin{cases} \frac{1}{2^{N/2} \Gamma(N/2)} x^{(N/2)-1} e^{-x/2} & \text{para } x \geq 0 \\ 0 & \text{para } x < 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

2) Tiene valor medio N y varianza 2N.

3) La densidad de probabilidad de la realización $x=(x^1, x^2, \dots, x^N)$, asumiendo que todas las distribuciones subyacentes siguen una distribución de Gauss, viene dada por, [Morrison 1990], [Peña 1991]:

$$f(x) = \frac{1}{|\Sigma|^{1/2} (2\pi)^{N/2}} e^{-\frac{1}{2}(x-x_0)^T \Sigma^{-1} (x-x_0)} = \frac{1}{|\Sigma|^{1/2} (2\pi)^{N/2}} e^{-\frac{1}{2}d_M^2(x, x_0)} \quad (3.11)$$

siendo de nuevo Σ la matriz de covarianzas de las variables.

3.2 Métricas de Mahalanobis y tensores de difusión.

En la sección anterior hemos visto como un movimiento Browniano de difusión sobre un espacio de fases define también un campo vectorial aleatorio sobre el mismo. Sobre cada uno de los espacios tangentes a la variedad puede definirse una variable aleatoria multidimensional cuya matriz de covarianzas resulta ser el tensor de difusión en ese punto.

Asociada a la matriz de covarianzas existe una métrica natural que mide la distancia entre dos variables aleatorias vectoriales teniendo en cuenta los valores de dispersión (covarianzas) entre las variables aleatorias componentes de la variable vectorial. Así pues, pasando a la interpretación física, los tensores de difusión inducen de manera natural una métrica sobre el espacio de fases que es la distancia de Mahalanobis asociada (salvo posibles factores 1/2).

Retomando, pues, la formulación dada por (3.4) tenemos en cada punto del espacio de fases una variable aleatoria vectorial de media V_0 y covarianzas $S_{\Delta V}$. Para no arrastrar el factor numérico, vamos a denotar como D a la matriz $\sigma\sigma^T$ que representa el valor de la difusión en D^2 . De este modo, tenemos que $S_{\Delta V}=D$. La métrica de Mahalanobis vendría dada pues por:

$$d_M^2 = S_{\Delta V}^{-1} = \frac{1}{|D|} \text{adj}(D) \quad (3.12)$$

donde la matriz adjunta $\text{adj}(D)$ se define como la traspuesta de la matriz C de cofactores de D . Recordemos que la matriz de cofactores viene definida por:

$$C_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij} \quad (3.13)$$

siendo M_{ij} el menor i,j de la matriz bajo cálculo (definido el menor i,j como el determinante de la matriz bajo cálculo tras sustraer la fila- i y columna- j). Por otro lado, para lo que sigue será importante reescribir la matriz adjunta como:

$$\text{adj}(D)_{ij} = \frac{\partial |D|}{\partial (D_{ji})} \quad (3.14)$$

que nos relaciona la matriz adjunta con las variaciones del determinante de una matriz [Leon 2006].

Podemos sacar varias consecuencias de las definiciones anteriores:

- La métrica de Mahalanobis es la inversa del tensor de difusión. En el capítulo anterior hemos visto como el operador de Laplace-Beltrami:

$$\Delta_{LB} = \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\sqrt{G} g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^j} \right) \quad (3.15)$$

sustituye al operador Laplaciano cuando la difusión se produce sobre una variedad de métrica g_{ij} con $\det(g_{ij})=G$. Las ecuaciones que expresaban la difusión Browniana sobre el espacio de fases en forma covariante, utilizaban la forma de este operador de Laplace-Beltrami donde g^{ij} venía dado por la matriz de difusión definida por el proceso Browniano (ver ecuación (2.50)). Sin embargo, acabamos de mostrar que el inverso de esta matriz de difusión, es una métrica, la distancia de Mahalanobis. Por tanto, la ecuación estocástica que define el movimiento Browniano sobre el espacio de fases (ecuación 3.1), puede verse también como la ecuación que describe la evolución de una función densidad de probabilidad sobre un espacio dotado de la métrica de Mahalanobis respecto del cual la

difusión es isótropa y el mecanismo de difusión viene dado por el operador Laplaciano asociado a esa métrica (operador de Laplace-Beltrami).

- Un segundo punto interesante es la interpretación de esa métrica o distancia de Mahalanobis. La distancia de Mahalanobis es una distancia adimensional. Aclaremos algo más este punto. En el caso de una variable aleatoria unidimensional es, simplemente $d_M^2(x, x_0) = (x - x_0)^2 / \sigma^2$. Por tanto, en esencia es la distancia euclídea, pero normalizada a un valor de dispersión dado por la varianza de la distribución de la variable aleatoria. Es decir, esta métrica introduce una escala o longitud típica en la cual medir la distancia y poder, así, clasificar las observaciones [Peña 1991]. ¿Es $(x - x_0)$ un valor alto o bajo? ¿La observación del valor "x" tiene probabilidad alta o baja? Depende de la escala que estemos utilizando. Esta escala viene dada por el valor de fluctuación, dado por la varianza de la distribución de x, σ^2 . Si, utilizando esta unidad de medida, la distancia es muy grande, esa observación tiene una baja probabilidad de acuerdo con (3.11). Si la distancia es pequeña, la fluctuación puede tener una probabilidad apreciable.

En el caso multidimensional, ¿es posible también introducir un factor de escala parecido?. En lo siguiente veremos que factor de los presentes hasta el momento representa esta longitud o escala fundamental. Para ello debería de aparecer en el denominador del cálculo de la distancia, del mismo modo en que aparecía anteriormente σ^2 . Dado que el tensor de difusión D es simétrico, podemos proceder a su diagonalización y calcular la métrica en la base en que es diagonal. En ese caso $D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)$. En esa misma base, la métrica de Mahalanobis sería $d_M^2 = \text{diag}(1/\lambda_1, 1/\lambda_2, \dots, 1/\lambda_N)$. Ahora bien, la inversa de cada uno de los autovalores del tensor de difusión se puede escribir como:

$$\frac{1}{\lambda_i} = \frac{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{i-1} \lambda_{i+1} \dots \lambda_N}{\prod_{j=1}^N \lambda_j} = \frac{1}{|D|} \frac{\partial |D|}{\partial \lambda_i} \quad (3.16)$$

Y si reescribimos esta métrica de nuevo en la base en la que D no es diagonal, obtendríamos de nuevo la expresión (3.12)

$$d_M^2 = S_{\Delta V}^{-1} = \frac{1}{|D|} \text{adj}(D)$$

Por tanto, el determinante del tensor de difusión nos da la escala de medida de las distancias sobre el espacio de fases. De hecho, tomando valores medios sobre todas las posibles realizaciones de la variable estocástica en (3.12) obtendríamos:

$$E[d_M^2(V, V_0)] = N = \frac{1}{|D|} E[\Delta V^T \text{adj}(D) \Delta V]$$

$$\Downarrow$$

$$|D| = \frac{E[\Delta V^T \text{adj}(D) \Delta V]}{N} \quad (3.17)$$

Así, este factor de escala, $|D|$ mediría la dispersión típica de las distancias por grado de libertad.

- El que se puede definir un factor de escala o longitud típica sobre el espacio de fases (esta longitud típica sería $\sqrt{|D|}$) permite definir una métrica sin este factor de escala. Efectivamente, tal como se ha explicado en párrafos anteriores, la distancia de Mahalanobis es una distancia adimensional, ya que su valor aparece normalizado por el anterior factor de escala. Podemos fácilmente convertir la métrica para que las distancias tengan una dimensión. Para ello basta quitar este factor y la métrica aparece reducida a ser $\text{adj}(D)$.
- El factor de escala también está sujeto a condiciones. Ya que proviene de un tensor de difusión simétrico y definido positivo su determinante debe ser mayor que cero. No puede ser igual a cero ya que esto no permitiría el cálculo de una matriz inversa que es, por definición, la métrica que hemos desarrollado hasta aquí. La condición es pues, que:

$$|D| > 0 \quad (3.18)$$

- Por último, la introducción de la métrica de Mahalanobis permite introducir nociones de indistinguibilidad y granulación sobre el espacio de fases. Todos los puntos (q, p) tales que su distancia a uno dado (q_0, p_0) den una probabilidad de aparición apreciable (dada por 3.10) pueden considerarse como indistinguibles. Esto supone dar un valor límite "m" en distancia (medida en unidades del factor de escala) a partir del cual considerar que estamos en la "región" perteneciente a otro punto. Los puntos que cumplan la anterior condición formarán una elipse en el espacio de fases dada por:

$$d_M^2(x, x_0) < m \quad (3.19)$$

3.3 Algunos ejemplos

Podemos aplicar las ideas anteriores al caso del movimiento Browniano que se discutió al final del capítulo anterior. Este era el dado por la ecuación estocástica en sentido de Íto (2.44):

$$dU_t = \begin{pmatrix} \mu_0 p \\ -K_0 q \end{pmatrix} dt + \begin{pmatrix} \sigma_\mu p & 0 \\ -\sigma_k \rho q & -\sigma_k q \sqrt{1-\rho^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dW_t^\mu \\ dW_t^K \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

El tensor de difusión vendrá entonces dado por:

$$D = \begin{pmatrix} \sigma_\mu^2 p^2 & -C_{\mu k} q p \\ -C_{\mu k} q p & \sigma_k^2 q^2 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

La métrica de Mahalanobis asociada resulta ser:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{\sigma_k^2}{p^2} & \frac{C_{\mu k}}{q p} \\ \frac{C_{\mu k}}{q p} & \frac{\sigma_\mu^2}{q^2} \end{pmatrix} \frac{1}{(\sigma_k^2 \sigma_\mu^2 - C_{\mu k}^2)} \quad (3.22)$$

Y el factor de escala, dado por el determinante del tensor de difusión es:

$$\Omega(p, q) = (\sigma_k^2 \sigma_\mu^2 - C_{\mu k}^2) p^2 q^2 \quad (3.23)$$

Esta escala es dependiente del punto concreto sobre el espacio de fases dónde está definida la métrica y su valor aumenta en regiones del espacio de fases con valores altos de p o q .

Esta métrica no es una métrica plana como evidencia el cálculo de los símbolos de Christoffel de segundo tipo que definen la derivada covariante. Esto es:

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{11}^1 &= \frac{1}{\Omega} C(Cp^2 - \sigma_k^2 q^2)q \\
 \Gamma_{12}^1 &= \frac{1}{\Omega} \sigma_\mu^2 p(Cp^2 - \sigma_k^2 q^2) \\
 \Gamma_{22}^1 &= -\frac{1}{\Omega} \sigma_\mu^2 \frac{p^2}{q} (Cq^2 - \sigma_\mu^2 p^2) \\
 \Gamma_{11}^2 &= -\frac{1}{\Omega} \sigma_\mu^2 \frac{q^2}{p} (Cp^2 - \sigma_k^2 q^2) \\
 \Gamma_{12}^2 &= \frac{1}{\Omega} \sigma_k^2 q(Cq^2 - \sigma_\mu^2 p^2) \\
 \Gamma_{22}^2 &= \frac{1}{\Omega} Cp(Cq^2 - \sigma_\mu^2 p^2)
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

donde se ha tomado $C=C_{\mu k}$ y $\Omega=\Omega(q,p)$ definido por (3.23). En las expresiones (3.24) sólo aparecen los términos no nulos.

El segundo tipo de métrica, en la que no está incluido este factor de escala, viene dada por la matriz adjunta del tensor de difusión. En este caso es:

$$g_{adj} = \begin{pmatrix} \sigma_k^2 q^2 & C_{\mu k} p q \\ C_{\mu k} p q & \sigma_\mu^2 p^2 \end{pmatrix} \tag{3.24}$$

Para esta métrica los símbolos de Christoffell no nulos resultan:

$$\Gamma_{11}^1 = \frac{1}{q}; \Gamma_{22}^2 = \frac{1}{p} \tag{3.25}$$

Y para esta métrica ya resulta más sencillo calcular, por ejemplo, cuáles son las ecuaciones de las geodésicas, resultando:

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 p}{dt^2} + \frac{1}{p} \left(\frac{dp}{dt} \right)^2 &= 0 \\
 \frac{d^2 q}{dt^2} + \frac{1}{q} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 &= 0
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

3.4 Métricas planas sobre el espacio de fases

En este apartado vamos a tratar de definir una métrica plana sobre el espacio de fases, tratando, de igual modo a cómo se ha realizado en los capítulos anteriores, de relacionar la definición con algún parámetro físico.

Para ello vamos a seguir tratando de definir un movimiento Browniano sobre el espacio de fases. El esquema general ya ha sido expuesto con anterioridad:

- Se define un Hamiltoniano dependiente de parámetros aleatorios.
- Las ecuaciones de Hamilton se interpretan como ecuaciones diferenciales estocásticas que nos definen un movimiento Browniano sobre el espacio de fases.
- Este movimiento produce un tensor de difusión que, a su vez produce varios objetos:
 - La variación de la matriz de covarianzas del vector solución $u=(q_t, p_t)$.
 - Un campo vectorial aleatorio sobre el espacio de fases.
 - Una métrica de Mahalanobis.
 - Un factor de escala.

Supongamos ahora que lo que tiene un comportamiento aleatorio no son las constantes μ, K que aparecen en el Hamiltoniano del oscilador armónico considerado hasta ahora, sino que lo que se produce es una indeterminación del origen de coordenadas (q_0, p_0) . Estas cantidades van a ser ahora dos variables aleatorias temporales de media cero y matriz de covarianzas:

$$V_{q_0, p_0} = \begin{pmatrix} \sigma_{q_0}^2 & C_{q_0, p_0} \\ C_{q_0, p_0} & \sigma_{p_0}^2 \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

donde C_{q_0, p_0} la covarianza entre dichas variables, definida por $\sigma_{q_0} \sigma_{p_0} \rho$ (siendo ρ la correlación entre ellas).

El Hamiltoniano a considerar es:

$$H = \frac{1}{2} \mu_0 (p - p_0)^2 + \frac{1}{2} K_0 (q - q_0)^2 \quad (3.28)$$

Físicamente el anterior Hamiltoniano podría representar un sistema armónico oscilante dónde la posición de equilibrio y la energía cinética cero están "indefinidas". Dado que en un muelle o péndulo estas dos posiciones se corresponden con la posición de reposo

y la posición de máxima amplitud, lo anterior exige una indefinición en ambas posiciones.

Operando en el Hamiltoniano (3.28) podemos escribirlo como:

$$H = \frac{1}{2} \mu_0 p^2 + \frac{1}{2} K_0 q^2 + -(\mu_0 p_0 p - K_0 q_0 q) + cons \quad (3.29)$$

donde el término *cons* designa un término que no depende de (q,p) y que no tiene influencia sobre las ecuaciones de evolución. Estas resultan ser:

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= \mu_0 p - \mu_0 p_0 \\ \frac{dp}{dt} &= -K_0 q + K_0 q_0 \end{aligned} \quad (3.30)$$

Estas ecuaciones deben ser entendidas como ecuaciones estocásticas de Íto, produciendo una ecuación estocástica bidimensional para $U=(q,p)$ dada por:

$$dU_t = A_0 U_t dt + (-A_0) dB \quad (3.31)$$

donde la matriz A_0 es la definida anteriormente en (2.32). El proceso Browniano bidimensional dB está correlado. Para ello, volvemos a verlo formado por dos procesos de Wiener standard, definidos por:

$$\begin{pmatrix} dB_{q_0} \\ dB_{p_0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{q_0} & 0 \\ \sigma_{p_0} \rho & \sigma_{p_0} \sqrt{1-\rho^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dW_{q_0} \\ dW_{p_0} \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

Con lo que la ecuación (3.31) puede escribirse como:

$$\begin{aligned}
 dU_t &= A_0 U_t dt + \begin{pmatrix} -\mu_0 \sigma_{p_0} \rho & -\mu_0 \sigma_{p_0} \sqrt{1-\rho^2} \\ K_0 \sigma_{q_0} & 0 \end{pmatrix} dW \\
 &\Downarrow \\
 dU_t &= A_0 U_t dt + \begin{pmatrix} -\mu_0 \sigma_{p_0} \rho \\ K_0 \sigma_{q_0} \end{pmatrix} dW_{q_0} + \begin{pmatrix} -\mu_0 \sigma_{p_0} \sqrt{1-\rho^2} \\ 0 \end{pmatrix} dW_{p_0} \\
 &\Downarrow \\
 dU_t &= A_0 U_t dt + b^{q_0} dW_{q_0} + b^{p_0} dW_{p_0}
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

donde se han introducido los vectores $b^{q,p}$ tal como aparecen definidos en las expresiones (3.33).

Al contrario de lo que ocurría en el movimiento Browniano del capítulo anterior, la aleatoriedad introducida en el sistema es aditiva y no multiplicativa. Esto hace que exista una solución analítica que viene dada por [Cyganowski 2001]:

$$\begin{aligned}
 U_t &= \Phi_{t,t_0} (U_{t_0} + \sum_j \int_{t_0}^t \Phi_{s,t_0}^{-1} b^j(s) dW_j(s)) \\
 \frac{d\Phi_{t,t_0}}{dt} &= A_0 \Phi_{t,t_0}
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

donde Φ_{t,t_0} es una matriz definida por la segunda de las ecuaciones (3.34). Como dato más relevante podemos fijarnos de nuevo en los valores del primer (m) y segundo momento (P) del proceso estocástico. Estos valores vienen dados por [Cyganowski 2001]:

$$\begin{aligned}
 \frac{dm}{dt} &= A_0 m \\
 \frac{dP}{dt} &= A_0 P + P A_0^T + \sum_j b^j b^{jT}
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

A partir de estas dos ecuaciones, podemos calcular de nuevo la variación de la matriz de covarianzas del proceso definida por

$$V_{qp} = \begin{pmatrix} \sigma_q^2 & C_{qp} \\ C_{qp} & \sigma_p^2 \end{pmatrix} \tag{3.36}$$

en un procedimiento totalmente análogo al del capítulo anterior. El resultado arrojado aparece en la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}\frac{dV_{qp}}{dt} &= A_0 V_{qp} + V_{qp} A_0^T + V_{q_0, p_0} \\ V_{q_0, p_0} &= \sum_j b^j b^{iT} = \begin{pmatrix} \mu_0^2 \sigma_p^2 & -C_{q_0, p_0} w^2 \\ -C_{q_0, p_0} w^2 & K_0^2 \sigma_q^2 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (3.37)$$

donde se ha utilizado que $w^2 = \mu_0 K_0$ que es la frecuencia de oscilación. Por último, podemos reescribir (3.37) para ver claramente la forma de variación de las varianzas, resultando, en analogía con (2.41):

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \sigma_q^2 \\ \sigma_p^2 \\ C_{qp} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2\mu_0 \\ 0 & 0 & -2K_0 \\ -K_0 & \mu_0 & -w^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_q^2 \\ \sigma_p^2 \\ C_{qp} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mu_0^2 \sigma_{p_0}^2 \\ K_0^2 \sigma_{q_0}^2 \\ -w^2 C_{q_0, p_0} \end{pmatrix}\quad (3.38)$$

En cuanto a su modelización como un movimiento Browniano del tipo (3.1), obtendríamos:

$$\begin{aligned}d\mathbf{U}_t &= \boldsymbol{\mu}_t dt + \boldsymbol{\sigma}_t d\mathbf{W}_t \\ \boldsymbol{\sigma} &= \begin{pmatrix} -\mu_0 \sigma_{p_0} \rho & -\mu_0 \sigma_{p_0} \sqrt{1-\rho^2} \\ K_0 \sigma_{q_0} & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (3.39)$$

El tensor de difusión D definido en el capítulo anterior resulta ser $(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}^T)$:

$$D = \begin{pmatrix} \mu_0^2 \sigma_{p_0}^2 & -w^2 C_{q_0, p_0} \\ -w^2 C_{q_0, p_0} & K_0^2 \sigma_{q_0}^2 \end{pmatrix}\quad (3.40)$$

Y, a partir de este resultado podemos calcular ya las métricas asociadas al espacio de fases que se definieron en el capítulo anterior. La métrica de Mahalanobis es:

$$d_M^2 = \frac{1}{(\sigma_{q_0}^2 \sigma_{p_0}^2 - C_{q_0, p_0}^2) w^4} \begin{pmatrix} K_0^2 \sigma_{q_0}^2 & w^2 C_{q_0, p_0} \\ w^2 C_{q_0, p_0} & \mu_0^2 \sigma_{p_0}^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{(\sigma_{q_0}^2 \sigma_{p_0}^2 - C_{q_0, p_0}^2) w^2} \begin{pmatrix} \frac{1}{w^2} K_0^2 \sigma_{q_0}^2 & C_{q_0, p_0} \\ C_{q_0, p_0} & \frac{1}{w^2} \mu_0^2 \sigma_{p_0}^2 \end{pmatrix}\quad (3.41)$$

Que es una métrica plana que puede ser convertida a la euclídea con un cambio de coordenadas global válido para todos los puntos del espacio de fases.

Especialmente interesante es el factor de escala Ω' en (3.41) que aparece y que, en contraste con el caso del capítulo anterior, es una constante para todo el espacio de

fases. Este factor de escala Ω' es el denominador de la fracción que aparece en (3.41) tras introducir un w^2 dentro de la matriz. Su valor numérico es:

$$\sqrt{\Omega'} = \sqrt{|V_{q_0, p_0}|} w \quad (3.42)$$

Este factor simboliza un área sobre el espacio de fases, ya que es una longitud al cuadrado. También podemos ver esto, dado que es proporcional a la raíz cuadrada del determinante de la métrica, esto es, la forma de volumen, que, en este caso es un área. Pero las áreas sobre el espacio de fases representan energías ya que tienen la misma dimensionalidad que el Hamiltoniano cuadrático. Si denominamos a esa constante como \hbar , obtendríamos que

$$\sqrt{\Omega'} = \sqrt{|V_{q_0, p_0}|} w = \hbar w \Rightarrow \hbar = \sqrt{|V_{q_0, p_0}|} \quad (3.43)$$

La anterior expresión es inmediatamente reconocible como la constante de Planck asociada a la cuantización del oscilador armónico. Por tanto, para el caso de una métrica plana como la introducida aquí, una constante análoga a la constante de Planck aparece con un significado físico concreto. Es el área asociada a la indeterminación que la posición del origen de coordenadas (q_0, p_0) produce sobre el espacio de fases. ¿Qué puede significar físicamente esta condición? ¿Cómo podríamos producirla? Recordemos que una de las desventajas de la cuantización de Nelson es que el proceso estocástico introducido no venía acompañado de una clara significación física.

En este caso podemos echar mano de la analogía óptica descrita en el primer capítulo sobre la introducción. Allí se comentó que el análogo del oscilador armónico que hemos estudiado es una superficie óptica cuya superficie se puede representar por un paraboloide de revolución. La coordenada q mide la altura a la que incide un rayo en un plano perpendicular al eje óptico tomado como referencia mientras que la coordenada p mediría el ángulo respecto al eje óptico. Un proceso en el que (q_0, p_0) fuesen aleatorios, podría implementarse como una variación tanto del eje óptico como del vértice de la superficie óptica.

Por otro lado, y por contraposición a los ejemplos de movimiento Browniano del capítulo anterior, un ruido o aleatoriedad aditiva sobre el espacio de fases produce una difusión a la cual se le asocia una métrica plana y, por tanto, se pueden aplicar tanto los procesos de cuantización canónica como la regularización propuesta por Klauber.

En el capítulo final recapitularemos las principales conclusiones y comentarios del trabajo hasta el momento.

4. Discusión y conclusiones finales.

A continuación pasamos a comentar las principales conclusiones del trabajo.

- En primer lugar, una aleatoriedad que contemple no un solo Hamiltoniano, sino un conjunto de ellos no es representativo de un sistema “a cuantizar”. Si lo es cuando lo que queremos es estudiar el efecto de una perturbación aleatoria sobre un Hamiltoniano. En el caso del oscilador armónico estudiado, el efecto de esta aleatoriedad es la producción de una solución media que no se corresponde con el Hamiltoniano medio, sino con un sistema con disipación. Esta disipación está controlada principalmente por el grado de correlación entre las constantes de masa y recuperación que fluctúan. El modelo se ha comprobado computacionalmente en el estudio de la resonancia de un metamaterial para la producción de un índice de refracción negativo, donde la distancia entre los elementos del mismo está sujeta a errores experimentales de fabricación. El efecto medio de estas perturbaciones produce un ensanchamiento de la resonancia así como un desplazamiento de la misma, tal como aparece en el modelo.
- El segundo tipo de aleatoriedad es introducir una perturbación aleatoria temporal en las constantes que aparecen en el Hamiltoniano de dos formas distintas. Una de ellas de tipo “multiplicativo” en el que las constantes aleatorias multiplican a los valores de posición sobre el espacio de fases, y otra de tipo “aditivo” en el que dichas perturbaciones se suman a los valores de posición y momento sobre el espacio de fases.

En ambos casos dicha perturbación puede implementarse por medios físicos.

En el caso de la perturbación multiplicativa dicho proceso puede modelar la interacción de un oscilador con un potencial aleatorio y con un término de masa también aleatorio. Estos efectos de masa cambiante podrían ser debidos, por ejemplo, a efectos de adhesión de partículas cuando un pequeño oscilador se mueve en una cámara con gas enrarecido u otro tipo de partículas pequeñas [Gitterman 2010].

En el caso de la perturbación aditiva, un buen modelo puede ser el de una superficie óptica cuyo vértice vibra de manera aleatoria a la vez que gira también de manera aleatoria variando las posiciones del eje óptico e introduciendo asimetrías en el sistema óptico.

En ambos casos el proceso estocástico se modela mediante una difusión de $\hat{I}t_0$ sobre el espacio de fases que da origen a un tensor de difusión. Visto desde el punto de vista de las ecuaciones de Hamilton, el flujo estocástico se puede ver como la generación de un campo vectorial estocástico cuyo valor medio es el campo vectorial asociado al Hamiltoniano medio y cuya matriz de covarianzas es precisamente el tensor de difusión.

A partir de la matriz de covarianzas del campo vectorial aleatorio es posible calcular una métrica estadística bien definida como es la distancia de Mahalanobis. Esta distancia es la inversa del tensor de difusión lo cual permite ver la ecuación de Fokker Planck asociada al movimiento Browniano definida en un espacio de fases con la métrica dada precisamente por la métrica de Mahalanobis.

- Esta métrica puede o no ser plana. En el caso del ruido multiplicativo no lo es, mientras que el caso aditivo si lo es. En este último caso los procesos de cuantización canónica así como el mecanismo de Klauber están bien definidos. Además, la métrica de Mahalanobis produce por sí misma un factor de escala o volumen unidad sobre el espacio de fases. Ello permite interpretar ese factor como una escala de Planck que, en el caso del ruido aditivo, está asociada al determinante de la matriz de covarianzas de la aleatoriedad.

A este respecto es importante resaltar la siguiente pregunta. Dado que, definida una métrica sobre un espacio de fases, la forma de volumen puede calcularse o bien a partir de ella o bien a partir de la forma simpléctica del espacio de fases, podemos preguntarnos si ambos tipos de

formas son compatibles. Si la variedad es Kähler, ambas formas son compatibles. Para ello una condición es que la métrica derive de un potencial como

$$g = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial q \partial p} \quad (4.1)$$

siendo Φ una función potencial y (q,p) las coordenadas de posición y momento. En el caso de que la métrica sea constante sí que se puede encontrar una función potencial ($u^T (g/2)u; u = (q, p)$), por lo que se justifica la compatibilidad y abre nuevas vías de exploración.

En el caso del ruido multiplicativo la métrica es curva y las condiciones para la cuantización aparecen mucho más restrictivas.

Referencias Bibliográficas

[Cabrera 1998]: Cabrera J.M., Jesús Lopez F., Agullo López F. *Óptica electromagnética Volumen I: Fundamentos*. 2ª edición. Addison-Wesley/Universidad Autónoma de Madrid, 1998.

[Castillo 1989]: Torres del Castillo, G.F. "Estructuras simplécticas en la física matemática". *Revista Mexicana de Física*, N° 2, 301-318, (1989).

[Cyganowski 2001]: Cyganowski, Kloeden, Ombach, *From Elementary probability to Stochastic Differential Equations with MAPLE*. Universitext, Springer, 2001.

[Dirac 1930]: Dirac, *The principles of quantum mechanics*. Claredon Press, Oxford, 1930.

[Fredkin 2001]: Fredkin, D.R. "Brownian motion on manifolds, with applications to thermal magnetization reversal", *Physica B*, Vol. 306, N° 1, December 2001, pp. 26-32(7), Elsevier.

[Glen 2002]: Glen, A.G, Leemis, L.M, Drew, J.H, "Computing the distribution of the product of two continuous random variables", *Computational Statistics and Data Analysis*" (2002).

[Goldstein 1987]: Goldstein, H. *Mecánica clásica*, Ed. Reverté, 1987.

[Gosson 2011]: Gosson M., Hiley B. "Imprints of the Quantum World in Classical Mechanics". *Found. Phys.* DOI 10.1007/s10701-011-9544-5, 26 February 2011.

[Guerra 1983]: Guerra F., Marra R., "Origin of the quantum observable operator algebra in the frame of stochastic mechanics". *Physical Review D.*, Vol. 28, N° 8, 1983.

[Guerrard 1975]: Guerrard A., Burch J.M. *Introduction to matrix methods in optics*. Ed. Dover, New York, 1975.

[Guerrero 1995]: Guerrero B. Lezama O. "Estructura geométrica y algebraica de las mecánicas clásica y cuántica".

[Guillemin 1984]: Guillemin V, Sternberg S. *Symplectic techniques in physics*. Cambridge University Press, 1984.

[Guiterman 2010]: Guiterman. "New Stochastic Equation for a harmonic oscillator: Brownian motion with adhesion" *International Conference on Theoretical Physics, Dubna-Nano 2010 IOP Publishing, Journal of Physics: Conference Series 248 (2010)*.

- [Hofer 1994]: Hofer H., Zehnder E. *Symplectic Invariants and Hamiltonian dynamics*. Birkhäuser Verlag, 1994.
- [Hooft 1988]: Gerard’Hooft. “Equivalence relations between deterministic and Quantum mechanical systems”. *Journal of Statistical Physics*, Vol. 53, Nos. 1/2. 1988.
- [Hooft 1999]: Gerard’Hooft. “Quantum gravity as a dissipative deterministic system”. *Class. Quantum. Grav.* 16 (1999) 3263-3279.
- [Hsu]: Hsu, E.P, A Brief introduction to brownian motion on a Riemann manifold. Department of Mathematics, Northwestern University.
- [Klauder 1996a]: Klauder J.R. “Is Quantization Geometry?”. International Conference on 70 years of quantum mechanics and recent trends in theoretical physics. Calcutta, India, 1996. arXiv.quant.ph/9604032v1 26 April 1996.
- [Klauder 1996b]: Klauder J.R., Maraner P. “Dynamics as Shadow of Phase Space Geometry” arXiv:quant-ph/9609004v1 5 Sept. 1996.
- [Kloeden 1992]: Kloeden, Platen. *Numerical solutions of Stochastic Differential Equations*. Stochastic modelling and applied probability 23. Springer 1992.
- [Lázaro-Camí 2007]: Lázaro-Camí J., Pablo Ortega J., “Stochastic Hamiltonian dynamical systems”. arXiv:math/0702787v5 [math.PR] 6 Oct 2007.
- [Leon 2006]: Leon, Steven J. (2006), *Linear Algebra With Applications* (7th ed.), Pearson Prentice Hall
- [López-Alonso 2002]: López-Alonso J.M., Alda J. "Bad pixel identification by means of Principal Component Analysis", *Opt. Eng.* **41**(9), 2152-2157 (2002).
- [Martínez 2003]: Martínez Barbeito J, Villalón J.G. 2003. Introducción al cálculo estocástico. Editorial Netbiblo, A Coruña.
- [Misawa 1987]: Misawa T., Yasue K. “Canonical stochastic dynamical systems” *J. Math. Phys.* 28 (11), November 1987.
- [Moro 1999]: Moro E. *Estudio analítico y numérico de ecuaciones diferenciales estocásticas: Aplicación a la Mecánica Estadística*. Tesis Doctoral. Univ. Carlos III de Madrid, 1999, Capítulo 2,
- [Morrison 1990]: Morrison D.F., *Multivariate Statistical Methods*, 3rd edition. McGraw Hill, Singapore (1990).
- [Morrison 1990]: Morrison, D.F. *Multivariate Statistical Methods* 3rd Edition, McGraw-Hill International, Singapore.
- [Nelson 1966]: Nelson E. “Derivation of the Schrödinger equation from Newtonian Mechanics”. *Physical Review*, Vol. 150, N° 4, October 1966.

[Peña 1991]: Peña Sánchez de Rivera D., *Estadística, Modelos y Métodos I. Fundamentos*. Alianza Universidad Textos, Madrid (1991).

[Rico 2011]: Rico-García J.M., López-Alonso, J.M., Aradian Ashod, “Toy model to describe the effect of positional disorder in metamaterials composites”. *J. Opt. Soc. Am. B*, Vol. 28, N° 12, December 2011 (In press).

[Rohatgi 1976]: Rohatgi,V.K, 1976. An introduction to Probability Theory Mathematical Statistics, Wiley, New York.

[Sagrario 2004]: Sagrario Millán M., Escofet J. Pérez E. *Óptica Geométrica*. Ed. Ariel, Barcelona 2004.

[Simms, Woodhouse 1976]: Simms, D.J, Woodhouse,N.M.J. *Lectures Notes on Geometric Quantization*. Lecture Notes in Physics, N° 53, Springer-Verlag, Berlín, (1976).

[Simon 2000]: Simon R., Wolf K. “Structure of the set of paraxial optical systems”, *J. Opt. Soc. Am. A*, Vol. 17, N° 2, 2000.

[Smolin 2011]: Smolin L. “ A real ensemble interpretation of quantum mechanics”. arXiv:1104.2822v1 [quant-ph] 14 April 2011.

[Sternheimer 1998]: Sternheimer D. “Deformation Quantization: Twenty years after” arXiv:math/9809056v1 [math QA] 10 Sept. 1998.

[Torre 2005]: Torre A. *Linear Ray and Wave Optics in Phase Space*. Ed. Elsevier B.V. Netherlands 2005.

[Weinstein 1994]: Weinstein A. “Deformation Quantization”. Séminaire BOURBAKI, n° 789, 1993-94, Juin 1994.

[Wolf 2004]: Wolf K. *Geometric optics on phase space*. Ed. Springer-Verlag, Berlín, 2004.

DECLARACIÓN

El abajo firmante, D. José Manuel López Alonso, matriculado en el Máster en Investigación Matemática de la Facultad de Ciencias Matemáticas, autoriza a la Universidad Complutense de Madrid (UCM) a difundir y utilizar con fines académicos, no comerciales y mencionando expresamente a su autor el presente Trabajo Fin de Máster: “**Geometría simpléctica y cuantización**”, realizado durante el curso académico 2010-2011 bajo la dirección de D. Otto Campoamor en el Departamento de Geometría y topología, y a la Biblioteca de la UCM a depositarlo en el Archivo Institucional E-Prints Complutense con el objeto de incrementar la difusión, uso e impacto del trabajo en Internet y garantizar su preservación y acceso a largo plazo.

Madrid 24 Noviembre 2011

Fdo. D. José Manuel López Alonso.