

CARACTERIZACIÓN DEL CAOS
CUÁNTICO MEDIANTE SERIES
TEMPORALES

TESIS DOCTORAL

Armando Relaño Pérez

Directores

D. Eduardo Faleiro Usanos
D. José María Gómez Gómez
D. Joaquín Retamosa Granado

22 de octubre de 2004

Agradecimientos

Hay tesis doctorales que nacen bajo una planificación estricta: se refieren a un tema concreto y sus pasos están casi determinados en el esquema previo que las pone en marcha; el doctorando que irrumpe en ellas apenas tiene más que subirse al tren y dedicar su esfuerzo a aprender, adaptarse y llevar adelante ese ritmo de trabajo. La tesis que presento en esta memoria no sólo no pertenece a ese grupo, sino que representa el otro extremo de la realidad científica. Hace ya cuatro años había muchas ideas y proyectos inconexos que llevar a la práctica; más de un programa de doctorado en el que inscribirse, y tantas maneras de pensar que nadie sabía muy bien cuál iba a ser el primer paso:

– Tenemos un proyecto conjunto con la gente del CIEMAT, destinado a estudiar ciertas propiedades estadísticas de los plasmas de fusión nuclear. Es un trabajo muy interesante y con muchas perspectivas –decía José María.

– Además de en plasmas de fusión ¿en qué otras líneas de investigación trabajáis? He visto algo de caos cuántico –decía el futuro doctorando.

– Si te interesa la física de plasmas, las líneas de investigación más interesantes están ahora en astrofísica –decía Joaquín.

A raíz de esa conversación yo salí como miembro en prácticas del grupo de investigación con un libro sobre caos cuántico bajo el brazo. Luego llegó Eduardo y dedicó su tiempo a enseñarme ciertas técnicas de análisis de datos, con la intención de prepararme para lo que pudiera venir a continuación. Y un día cualquiera todo eso confluyó: nació la δ_n y el ruido $1/f$, y se abrió un campo inmenso que aún no hemos recorrido por completo tras casi cuatro años de trabajo.

Agradezco a José María su confianza desde el primer momento y el haberme abierto las puertas de este grupo de investigación.

A Joaquín y a Eduardo todo su tiempo, esfuerzo, dedicación y paciencia invertidos en mí durante estos años. También ellos demostraron desde el primer día una confianza en mis ideas y en mi trabajo mucho mayor de la que me correspondía como inocente recién licenciado: desde el primer momento me trataron como un investigador más y nunca dudaron de mis posibilidades de seguir adelante. Aunque la tesis doctoral es básicamente el trabajo de una persona, sin su dedicación este trabajo no habría sido posible. Además, todos estos años de convivencia han puesto

de manifiesto, una vez más, que lo más importante son las personas y que a partir de un buen ambiente se puede lograr casi cualquier cosa.

A Rafa por todas sus ideas, sugerencias y horas de trabajo, que son parte imprescindible de este tesis doctoral. Cuando un doctorando principiante se pone en marcha sin más experiencia que 63 exámenes y unas prácticas, apenas se cree capaz de defenderse en una labor mucho más creativa. Con su ejemplo, Rafa me demostró que ese paso adelante es posible y me guió para llevarlo a término.

A Raquel por su amistad, plasmada en estos años en conversaciones, cafés, cenas, actividades de todo tipo, excursiones, viajes y todas las demás cosas que ahora mismo se me olvida enumerar. A César también por su amistad, por su atención y por todos los proyectos utópicos compartidos en este mismo despacho. A Javi y a Laura por todos los momentos compartidos como insignificantes becarios, fuera y dentro de la facultad. A Cristina por lo mismo, a pesar de los más de quinientos kilómetros de distancia. A José Manuel por el tiempo dedicado a curar las indisposiciones de los ordenadores.

A Oriol Bohigas y Patricio Leboeuf por su acogida en Orsay y por todo lo que me han enseñado durante los meses que estuve con ellos; buena parte de este trabajo se basa en los conceptos y en las técnicas que aprendí durante esos meses. A Alejandro Monastra por participar directa e indirectamente en este proceso de aprendizaje.

A Marko Robnik, Luca Salasnich, H. J. Stöckmann y todos los miembros de sus respectivos equipos por su colaboración y por las discusiones que me han servido de gran ayuda en muchos momentos. A Peter Hodgson también por sus enseñanzas y su gran experiencia.

A Anton Antonov por todos los cafés y conversaciones que mantuvimos durante el año que estuvo invitado en nuestro departamento. Su compañía ha sido siempre muy agradable, y su experiencia y cultura me han servido de gran ayuda en muchos momentos.

A Antonio por todas las sobremesas, cafés, charlas y paseos por París. La estancia en un centro de investigación extranjero supone una gran experiencia y un desafío, pero siempre resulta agradable encontrarse con gente con la que se comparte el idioma.

A Saúl, Silvia, Alma y Sise por los días que estuvieron conmigo en París. Por un lado su presencia me forzó a repetir una y otra vez los mismos recorridos turísticos, como si trabajara de guía ambulante en los bulevares, museos y monumentos de esa ciudad; pero por otro, y mucho más importante, me hicieron disfrutar de fines de semana que habrían quedado vacíos sin su presencia. Al primero le agradezco, además, las múltiples conversaciones sobre investigaciones, tesis y muchos otros proyectos más o menos utópicos.

A todos los entalcados, pero en especial a doble, heco, lola, miguelito, omaha soch, sparrow, y super, por todas las tediosas horas de las que me han librado, mientras el ordenador calculaba, se atascaba, escupía resultados absurdos e inexplicables

e incompatibles con los de la última simulación: por haber cambiado desesperación por sonrisas durante esos periodos indescriptibles.

Y para finalizar, a Julio Cortázar, a José Saramago, a Jorge Luis Borges, a William Faulkner y a tantos otros que me han enseñado no sólo a expresarme por escrito, sino también que se puede disfrutar jugando a construir un texto. A Raúl y Paula por llenar de anécdotas inolvidables muchos meses durante la construcción de esta tesis.

Índice general

Cita	I
Agradecimientos	I
Índice general	V
Índice de figuras	IX
Índice de tablas	XIII
1. Introducción	1
2. Caos y mecánica cuántica	5
2.1. Origen del caos: mecánica clásica	5
2.1.1. Introducción	6
2.1.2. Sistemas integrables	7
2.1.3. De la integrabilidad al caos: teorema KAM	10
2.1.4. Fenomenología del movimiento caótico	11
2.2. Signos del caos en mecánica cuántica	16
2.2.1. Integrabilidad en mecánica cuántica	18
2.2.2. Fenomenología del caos en mecánica cuántica	20
2.2.3. Trazas del caos en observables cuánticos	23
2.3. Cuantización y espectro de energías	24
2.3.1. Cuantización de sistemas integrables	25
2.3.2. Cuantización de sistemas caóticos	29
2.3.3. Universalidad de las fluctuaciones	33
2.3.4. Teoría de matrices aleatorias	37
2.3.5. Estadísticos espectrales	40
2.3.6. Sistemas intermedios	46

3. Autosimilaridad y series temporales	51
3.1. Series temporales y espectros de energías	51
3.2. Autosimilaridad	53
3.2.1. Leyes de potencias	54
3.2.2. Movimiento browniano	54
3.2.3. Dimensión fractal	58
3.3. La transformada de Fourier	59
3.3.1. El ruido $1/f$	60
4. Caracterización de sistemas cuánticos caóticos e integrables	65
4.1. La función δ_n	66
4.2. Estudio de matrices aleatorias	68
4.2.1. Colectividades Gaussianas	68
4.2.2. Interacciones Gaussianas aleatorias	74
4.3. Estudio de un sistema de muchos cuerpos: el núcleo atómico	83
4.4. Estudio de billares cuánticos	89
4.4.1. Billar integrable	90
4.4.2. Billares caóticos	99
4.5. Conjetura	104
5. Teoría del ruido $1/f$ en caos cuántico	107
5.1. Notación y definiciones básicas	107
5.1.1. Notación general	108
5.1.2. Notación y definiciones en caos cuántico	108
5.2. Cálculo para un sistema integrable	112
5.2.1. Resultados	114
5.3. Cálculo para un sistema caótico	116
5.3.1. Cálculo de $\overline{P_k^{\tilde{n}_L}}(\tau)$	117
5.3.2. Cálculo de $\overline{P_k^{\tilde{n}_s}}$ como aproximación a $\overline{P_k^{\tilde{n}_s}}(\tau)$ mediante muestreo	118
5.3.3. Relación entre $\overline{P_k^{\tilde{n}}}$ y $\overline{P_k^{\delta}}$	122
5.3.4. Resultados	126
5.4. Conclusión	129
6. Sistemas intermedios	131
6.1. Billar de Robnik	131
6.1.1. Definición y propiedades del billar de Robnik	132
6.1.2. Cálculo de los autovalores y método de reescalado	134
6.1.3. Resultados	134
6.2. Colectividad de matrices DGOE	140
6.2.1. Definición de la colectividad DGOE	141
6.2.2. Cálculo de autovalores y método de reescalado	143

6.2.3.	Resultados	143
6.3.	Transición hacia el espectro equiespaciado: matrices Lanczos	149
6.3.1.	Definición de las matrices Lanczos	150
6.3.2.	Cálculo de autovalores y método de reescalado	150
6.3.3.	Resultados	151
6.3.4.	Conclusión general: antipersistencia y repulsión de niveles	157
7.	Conclusiones	159
7.1.	Conclusiones principales del trabajo	159
7.2.	Resumen de resultados	160
A.	Teoría de matrices aleatorias	167
A.1.	Colectividades Gaussianas	167
A.2.	Funciones de correlación	168
A.3.	Estadísticos espectrales	168
A.3.1.	Correlaciones de corto alcance	168
A.3.2.	Correlaciones de largo alcance	169
B.	Transformada de Fourier	173
B.1.	Definición de la transformada de Fourier	173
B.1.1.	Aplicación a procesos estocásticos	174
B.1.2.	Procedimientos de cálculo	176
B.1.3.	Muestreo y transformada de Fourier	177
B.1.4.	El teorema de la diferenciación	179
B.2.	El espectro de potencias	180
C.	Proceso de reescalado	183
C.1.	Definición del proceso de reescalado	183
C.2.	Cálculo analítico de $\overline{N}(E)$	183
C.3.	Aproximación de $\overline{N}(E)$	184

Índice de figuras

2.1.	Efecto mariposa en un mapa logístico	13
2.2.	Exponente de Lyapunov en un mapa logístico	14
2.3.	Espectro de Fourier del mapa logístico	17
2.4.	Cuantización de un hamiltoniano $H = I_1^2 + I_2^2$ según reglas SIW.	28
2.5.	Comparación entre un espectro caótico, un espectro regular y un espectro equiespaciado.	36
2.6.	Distribución de espaciamentos de próximos vecinos para un sistema caótico y un sistema integrable	43
2.7.	Estadístico $\Delta_3(L)$ para un sistema caótico y para un sistema integrable.	45
3.1.	Movimiento browniano fraccionario.	56
3.2.	Función de correlación $C(\tau)$ para señales con espectro de potencias $P(\omega) \propto \omega^\alpha$	62
3.3.	Función de correlación $C(\tau)$ para ruidos $1/f$	63
4.1.	Comparación de un espectro caótico y un espectro equidistante. Definición de δ_n	66
4.2.	Función δ_n para una matriz de cada colectividad	71
4.3.	Espectro de potencias medio para las colectividades GOE, GUE, GSE y GDE.	72
4.4.	Densidad de estados para matrices EGOE $(l, m) = (13, 6)$ en función del número de cuerpos de la interacción.	78
4.5.	Espectro de potencias de la función δ_n para matrices EGOE $(l, m) = (13, 6)$ en función del número de cuerpos de la interacción.	79
4.6.	Espectro de potencias para distintas colectividades TBRE de 6 partículas con interacciones a dos cuerpos.	80
4.7.	Probabilidad $P(\alpha)$ de obtener un valor determinado de α para distintas colectividades TBRE de 6 partículas.	82
4.8.	Función δ_n para el ^{24}Mg	86
4.9.	Espectro de potencias de la función δ_n para el ^{24}Mg	87

4.10. Espectro de potencias promedio para el ^{24}Mg utilizando espectros de longitud $L = 256$ y $L = 512$	88
4.11. Función δ_n para un billar rectangular a alta energía.	94
4.12. Espectro de potencias de la función δ_n para un billar rectangular a alta energía.	95
4.13. Probabilidad $P(\alpha)$ de obtener un valor determinado de α para 200 secuencias de alta energía en un billar rectangular.	96
4.14. Espectro de potencias promedio para una colectividad de 200 secuencias de niveles de alta energía de un billar rectangular.	97
4.15. Espectro de potencias de la función δ_n para un billar rectangular a baja energía.	98
4.16. Esquema del billar de Sinai utilizado en el experimento.	102
4.17. Función δ_n para distintas secuencias correspondientes al billar de Sinai experimental.	103
4.18. Espectro de potencias medio para el billar de Sinai experimental.	104
5.1. Espectro de potencias teórico y numérico para la colectividad GDE.	115
5.2. Espectro de potencias teórico y numérico para un billar rectangular a alta energía.	116
5.3. Factor de forma para la RMT.	120
5.4. Espectros de potencias teóricos y numéricos para la RMT.	127
5.5. Espectro de potencias teórico y numérico para el ^{34}Na con $N = 256$	128
5.6. Espectro de potencias teórico y numérico para la realización experimental del billar de Sinai.	129
6.1. Esquema del billar de Robnik	133
6.2. Función δ_n para billares de Robnik con distinto λ	136
6.3. Espectro de potencias de la función δ_n para billares de Robnik con distinto λ	137
6.4. Comparación entre el espectro de potencias y el volumen caótico del espacio de fases en un billar de Robnik.	139
6.5. Espectro numérico y teórico caótico para billares de Robnik con distinto λ	140
6.6. Función δ_n para matrices DGOE con $N = 2000$ y diferente ϵ	145
6.7. Espectro de potencias medio para matrices DGOE con $N = 2000$ y diferente ϵ	146
6.8. Espectro de potencias medio para matrices DGOE con $\epsilon = 1/500$ y diferentes dimensiones.	147
6.9. Frecuencia a la cual el sistema deja de ser integrable en función del tamaño de la matriz.	148
6.10. Espectro de energías para matrices H_{GOE}^F con distintos valores de F	152

6.11. Distribución $P(s)$ para matrices Lanczos con distinto valor de F	153
6.12. Función δ_n para matrices Lanczos con distinto valor de F	154
6.13. Espectro de potencias para matrices Lanczos con distinto valor de F	156
B.1. Espectro de potencias de una realización de una matriz EGOE(2) utilizando diferentes promedios.	180
C.1. Función $N(E)$ para los primeros niveles de un espectro GOE de dimensión $N = 10000$	185
C.2. Función $N(\epsilon)$ para los primeros niveles reescalados de un espectro GOE de dimensión $N = 10000$	186
C.3. Función δ_n para una matriz GOE reescalada utilizando polinomios de Chebyshev a distintos órdenes.	188
C.4. Espectro de potencias de la función δ_n para una matriz GOE reescalada utilizando polinomios de Chebyshev a distintos órdenes.	189

Índice de tablas

4.1.	Valores del parámetro α para GDE, GOE, GUE y GSE.	73
4.2.	Valor del exponente α en función del número de cuerpos de la interacción para matrices EGOE $(l, m) = (13, 6)$	80
4.3.	Dimensión y valores de α para diversas colectividades TBRE de 6 partículas.	81
4.4.	Valor medio y dispersión de $P(\alpha)$ para diversas colectividades TBRE de 6 partículas.	83
4.5.	Valores de J y dimensión de cada caja para el ^{24}Mg	84
4.6.	Valores del exponente α para los distintos espectros con momento angular J bien definido del ^{24}Mg	85
4.7.	Valores del exponente α para el ^{24}Mg promediado utilizando espectros de longitud $L = 256$ y $L = 512$	89
4.8.	Valor del parámetro α para 4 secuencias de niveles de alta energía de un billar rectangular.	93
5.1.	Resumen de la notación empleada	112
5.2.	Factores de forma para las distintas colectividades de RMT.	125
6.1.	Número de secuencias para cada valor de λ	135
6.2.	Valores del exponente α para billares de Robnik con distinto λ	138
6.3.	Valores del parámetro de repulsión β para matrices Lanczos con distinto valor de F	155
6.4.	Valores del parámetro de α para matrices Lanczos con distinto valor de F	155
6.5.	Comparación entre el valor real de F y el obtenido mediante (6.21).	157
C.1.	Valor del espaciamento medio $\langle s \rangle$ para un espectro GOE reescalado con polinomios de Chebyshev de diferente orden.	186

Capítulo 1

Introducción

A pesar de la falta de una definición precisa, el caos cuántico es una disciplina muy estudiada; el gran número de publicaciones en revistas internacionales de prestigio, como *Physical Review Letters*, es una buena muestra de ello. Desde 1984, año en el que Bohigas, Giannoni y Schmit formularon la conjetura BGS, hasta el día de hoy, el caos cuántico ha pasado de ser una disciplina casi cualitativa, basada en la comparación de fluctuaciones espectrales con la teoría de matrices aleatorias, a tener importantes cimientos teóricos fundamentados en la teoría semiclásica. No obstante, aún sigue siendo un pequeño misterio por qué sistemas tan dispares como un billar cuántico y un núcleo atómico tienen propiedades comunes.

En esta tesis doctoral pretendemos incardinar un nuevo concepto a la teoría del caos cuántico. El modo más habitual (y más citado en la literatura) de discernir entre un sistema cuántico integrable o regular y un sistema cuántico caótico consiste en analizar las fluctuaciones del espectro de energía; grosso modo, la comparación de estas fluctuaciones con las de una secuencia completamente aleatoria y con las de espectros procedentes de la teoría de matrices aleatorias determina si el sistema en estudio es integrable o caótico. A pesar de la existencia de algunos contraejemplos, este método se ha mostrado muy eficaz y ha devenido en paradigma; sin embargo, adolece de una cierta dificultad conceptual: todos los estadísticos desarrollados para llevarlo a la práctica sólo son útiles en el marco de la teoría del caos cuántico, de forma que a veces no resulta sencillo interpretarlos cualitativamente. El cuerpo de la presente tesis doctoral se centra en el desarrollo y la aplicación de técnicas alternativas para el análisis de las fluctuaciones espectrales: técnicas tales que permiten la comparación de estas fluctuaciones con las que aparecen en otros muchos ámbitos de la naturaleza y que sólo tienen en común su elevada complejidad.

En el capítulo 2 presentamos un amplio resumen de la formulación y la fenomenología del caos en mecánica clásica y en mecánica cuántica. Algunos de los conceptos que se explican en él están, quizá, más allá de lo que es necesario para la comprensión de los resultados que presentamos en capítulos posteriores; su inclusión, empero, es-

tá justificada por completitud y para que el lector conozca todas las contradicciones que hacen imposible definir el caos cuántico de forma tan simple como se define el caos en mecánica clásica.

En el capítulo 3 esbozamos las técnicas de análisis de series temporales necesarias para comprender los cálculos que realizamos a lo largo de la tesis. Además, al final del capítulo se incluye un resultado importante sobre la estructura de correlación del ruido $1/f$. A pesar de no ser estrictamente novedoso, este resultado puede considerarse una contribución original porque es desconocido para la mayoría de los autores.

El capítulo 4 constituye el cuerpo central de la tesis. En primer lugar, definimos el estadístico que utilizamos en todos los capítulos posteriores: la función δ_n , que mide la desviación de cada nivel del espectro con respecto a su *valor medio*. Una vez definido, empleamos este nuevo estadístico para estudiar las fluctuaciones de un gran número de sistemas cuánticos, cada uno de los cuales puede considerarse un buen representante de la gran variedad de sistemas cuánticos que existen en la naturaleza: colectividades de matrices aleatorias, como ejemplo de modelos teóricos; billares cuánticos, tanto integrables como caóticos, simulados y realizados experimentalmente, como ejemplos del caos en sistemas de una sola partícula; y el núcleo atómico, calculado en aproximación del modelo de capas, como ejemplo del caos en un sistema cuántico de muchos cuerpos sin análogo clásico, es decir, que no admite descripción en aproximación semiclásica. El análisis de todos estos sistemas da lugar a la siguiente conclusión, que, expresada en forma de conjetura, constituye el principal resultado de la presente tesis doctoral: *las fluctuaciones del espectro de energías de los sistemas cuánticos caóticos constituyen un ruido $1/f$* .

En el capítulo 5 realizamos una derivación teórica de la conjetura que se acaba de presentar. En el caso de sistemas caóticos, utilizamos la teoría de matrices aleatorias como punto de partida para esa demostración, y mostramos que la aproximación semiclásica conduce al mismo resultado, al menos dentro del rango de energías en el cual las fluctuaciones del espectro de energías dependen sólo de las propiedades globales de la dinámica. En el caso de los sistemas integrables, realizamos una derivación más sencilla basada únicamente en la independencia estadística de los niveles del espectro. Ambas expresiones teóricas se validan comparándolas con los resultados obtenidos en el capítulo anterior.

El capítulo 6 está dedicado a los sistemas cuya dinámica no tiene unas propiedades globales bien definidas, es decir, a sistemas que no son caóticos ni integrables o que constituyen una transición entre diferentes tipos de comportamiento. Por lo que se refiere a los sistemas intermedios (ni caóticos ni regulares), estudiamos un ejemplo físico: el billar de Robnik, que puede considerarse un paradigma de la transición regularidad-caos, y la colectividad de matrices aleatorias DGOE; los resultados obtenidos no permiten formular una conjetura genérica como la del capítulo 4. Además, estudiamos una segunda colectividad de matrices aleatorias, que denominamos

genéricamente colectividad de matrices Lanczos, y que produce una transición entre un sistema caótico y un espectro de oscilador armónico, que se caracteriza por la ausencia de fluctuaciones cuánticas; el resultado nos permite concluir que el ruido $1/f$ es la manifestación de la repulsión de niveles característica del caos cuántico a partir de una cierta intensidad.

Por último, en los apéndices se incluyen algunos aspectos técnicos que conviene separar del cuerpo del trabajo para mantener la continuidad en la lectura. En el apéndice A se describen las propiedades de las principales colectividades de matrices aleatorias que hemos utilizado. En el apéndice B se adjuntan detalles técnicos, de definición y de implementación, de la transformada de Fourier, que es una herramienta fundamental en todos los cálculos realizados en los capítulos anteriores. Y en el apéndice C se comenta el proceso de reescalado, que constituye un paso previo necesario para estudiar las fluctuaciones de los espectros de energías.

Capítulo 2

Caos y mecánica cuántica

El estudio del caos cuántico constituye el núcleo de la presente tesis doctoral. En este capítulo se presenta un resumen de los resultados y teorías ya establecidos en esta disciplina, así como una descripción de la naturaleza y fenomenología del caos en mecánica clásica como base para el estudio del caos cuántico. Con todo ello se pretende que el lector disponga de una amplia base conceptual para la mejor comprensión de los resultados que se presentan en los capítulos posteriores. Por esa misma razón se evitan los detalles técnicos; el lector interesado en tales detalles dispone de una amplia bibliografía¹

2.1. Origen del caos: mecánica clásica

El caos es ubicuo en la naturaleza: sistemas hamiltonianos, mecánica celeste, fluidos, láseres, sistemas ópticos no lineales, sólidos, aceleradores de partículas, plasmas, reacciones químicas, dinámica de poblaciones, sistemas biológicos...; la variedad de sistemas en los que aparece el comportamiento caótico abarca toda la naturaleza. Casi todos estos ejemplos son macroscópicos y se describen, bien mediante las leyes de la dinámica clásica, bien mediante teorías efectivas complejas; en todos los casos, las ecuaciones resultantes son no lineales y presentan una rica fenomenología que da lugar al caos. El estudio de las propiedades de este tipo de sistemas es fundamental para entender el caos y para buscar su origen y sus manifestaciones en mecánica

¹La bibliografía sobre caos clásico y su extensión a la mecánica cuántica es muy amplia y muy heterogénea: incluye desde descripciones conceptuales hasta enfoques puramente matemáticos. La bibliografía que se adjunta en esta tesis doctoral no pretende ser representativa de este vasto conjunto de publicaciones; tan sólo constituye una guía adonde el lector puede dirigirse para ampliar o asentar los conceptos que se mencionan en este capítulo. Como ejemplo de obra sencilla, en la que predominan las explicaciones conceptuales sobre el lenguaje matemático, cabe destacar [1]; para un mayor rigor, el lector puede dirigirse a [2], donde se aborda la estructura matemática del caos; el vínculo entre el caos clásico y el caos cuántico se describe con gran detalle en [3].

cuántica.

2.1.1. Introducción

La mecánica clásica es determinista: las leyes de Newton son tales que el movimiento de una partícula queda perfectamente determinado en todo instante de tiempo si se conocen su posición y su velocidad en un instante cualquiera. Esta característica de la mecánica newtoniana es la responsable de que en el siglo XIX predominara una interpretación mecanicista de la realidad. Laplace, uno de los grandes desarrolladores de la mecánica, ilustró en 1819 este punto de vista con la siguiente cita: *Una inteligencia que conociera todas las fuerzas que animan la naturaleza, así como la situación respectiva de los seres que la componen, [...] podría abarcar en una sola fórmula los movimientos de los cuerpos más grandes del universo y los del átomo más pequeño; nada le resultaría incierto y tanto el futuro como el pasado estarían presentes a sus ojos* (extracto de su obra *Ensayo filosófico sobre las probabilidades* [4]).

No obstante lo anterior, el gran desarrollo que ha experimentado la física desde entonces hasta nuestros días ha terminado con la visión mecanicista de la realidad. Desde un punto de vista histórico puede considerarse que el mecanicismo se ha quebrado por tres frentes diferentes:

Primera ruptura: mecánica estadística. A lo largo de la segunda mitad del mismo siglo XIX se empezó a sistematizar el estudio de los sistemas complejos con muchos grados de libertad; se renunció a la descripción detallada (al estudio del movimiento exacto de cada componente) y se recurrió a una descripción probabilística, que es el origen de la mecánica estadística tal y como la conocemos hoy en día. Este cambio metodológico se debió a que los científicos de aquella época se percataron de que en los sistemas con muchos grados de libertad no es posible describir el movimiento de cada partícula por separado, ya que esa tarea requiere una potencia de cálculo absolutamente inalcanzable; el único modo de describir tales sistemas consiste en reducirlos a unas pocas variables significativas (presión, temperatura...). A pesar de ello, la mecánica newtoniana seguía considerándose válida en el fondo: se suponía que describía correctamente los movimientos individuales de cada partícula. Así pues, los mecanicistas concluyeron que la necesidad de una descripción probabilística era la expresión de una ignorancia vencible en principio; aún confiaban en que el desarrollo de las herramientas de cálculo permitiría en un futuro la descripción exacta de la naturaleza.

Segunda ruptura: mecánica cuántica. La primera crisis conceptual del mecanicismo (podemos considerar que la mecánica estadística supuso una crisis puramente metodológica) llegó con el siglo XX de la mano de la mecánica cuántica. Esta teoría, que supuso la primera gran revolución en la física moderna (la otra es la teoría de la relatividad) y que describe con casi total precisión el movimiento de las par-

tículas microscópicas, es una teoría intrínsecamente probabilística; los argumentos esgrimidos en favor del mecanicismo tras el nacimiento de la mecánica estadística no se pueden aplicar en esta ocasión. No obstante, los partidarios del mecanicismo pronto elaboraron nuevas argumentaciones en defensa de su forma de interpretar la realidad. Unos arguyeron que para la inmensa mayoría de los sistemas macroscópicos los efectos cuánticos no son importantes; así el determinismo y la idea de la total predictibilidad podían seguir manteniéndose, al menos desde un punto de vista práctico. Otros, más radicales en su defensa del mecanicismo, afirmaron que la mecánica cuántica es una teoría incompleta y que han de existir leyes deterministas que subyacen a ella. Esta idea ha dado pie a teorías alternativas a la mecánica cuántica basadas en la existencia de ciertas *variables ocultas*; en ellas se hallaría la información completa del sistema microscópico, que quedaría así descrito por leyes mecanicistas. Entre los primeros que defendieron este punto de vista destacan varios de los fundadores de la mecánica cuántica: Planck, Einstein, De Broglie y Schrödinger; el segundo de ellos sintetizó su punto de vista con la célebre frase *Dios no juega a los dados*.

Tercera ruptura: caos determinista. El golpe final al mecanicismo llegó al fin durante la segunda mitad del siglo XX, y llegó inopinadamente desde la propia mecánica newtoniana. Hasta entonces se pensaba que sólo los sistemas con muchos grados de libertad manifestaban un comportamiento complejo; se creía que los sistemas con pocos grados de libertad se comportaban de manera simple y fácilmente predecible. Sin embargo, en los últimos años del siglo pasado se descubrió que muchos sistemas sencillos poseen trayectorias de gran complejidad; en ellas, los errores inherentes a toda medida² crecen de forma violenta e incontrolable, hasta el punto de imposibilitar cualquier predicción a medio o largo plazo. Esta extraña complejidad que caracteriza a sistemas aparentemente sencillos es debida al carácter no lineal de las ecuaciones de la dinámica newtoniana; su origen, por tanto, se remonta a la propia estructura de las leyes físicas y no a nuestras limitaciones a la hora de utilizarlas.

2.1.2. Sistemas integrables

En general, los sistemas integrables presentan un comportamiento sencillo y predecible, mientras que los sistemas caóticos se comportan de forma muy complicada. En los sistemas integrables es posible encontrar, bien una solución exacta, bien una solución aproximada cuya precisión ϵ no depende del tiempo; el esfuerzo para calcular dicha solución es el mismo para todo tiempo t . En los sistemas caóticos, por el contrario, no es posible encontrar un algoritmo que permita calcular una solución

²Además de los errores experimentales deben considerarse los asociados a todo método de cálculo: tanto los correspondientes a métodos numéricos de integración, como los relacionados con la truncamiento de desarrollos en serie.

aproximada de la misma manera: el número de operaciones a realizar crece muy deprisa con el tiempo³. Esta radical diferencia cualitativa permite discernir con nitidez entre los sistemas integrables y los sistemas caóticos de una forma puramente fenomenológica.

El concepto de integrabilidad en mecánica clásica puede definirse también de una forma mucho más precisa. Considérese un sistema hamiltoniano con N grados de libertad cuyo hamiltoniano $H(q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N)$ no depende explícitamente del tiempo. Diremos que el sistema es integrable si existen N funciones independientes F_1, \dots, F_N que son constantes del movimiento $dF_i/dt = 0 \forall i$ y que están en involución⁴; el teorema de integrabilidad de Liouville nos garantiza que bajo esas condiciones las ecuaciones del movimiento son resolubles por cuadraturas; cuando esto ocurre, la trayectoria del sistema está confinada en un toro N -dimensional. Al no depender explícitamente del tiempo, el hamiltoniano es una de esas constantes del movimiento; por convención suele tomarse $F_1 \equiv H$.

En general, cada una de las N constantes del movimiento F_i puede considerarse una coordenada cuya coordenada conjugada es f_i ; de esta manera, las ecuaciones de evolución del sistema se reducen a

$$\frac{dF_i}{dt} = 0; \quad (2.1)$$

$$\frac{df_i}{dt} = W_i(F_1, \dots, F_N). \quad (2.2)$$

La simplicidad de estas ecuaciones pone de manifiesto la sencillez del movimiento en sistemas integrables; sin embargo, casi nunca es posible obtener este sistema de coordenadas mediante una transformación canónica a partir del sistema de coordenadas habitual de posiciones y momentos $(q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N)$. La existencia de estas N constantes del movimiento garantiza, no obstante, la existencia de otras N funciones I_1, \dots, I_N , $I_j = I_j(F_1, \dots, F_N) \forall j$ que cumplen: a) I_j es constante del movimiento $\forall j$; b) cada I_j es una coordenada con una conjugada ϕ_j ; c) el conjunto de coordenadas $(I_1, \dots, I_N; \phi_1, \dots, \phi_N)$ puede obtenerse mediante una transformación canónica a partir de $(q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N)$, de forma que el hamiltoniano puede escribirse $H = H(I_1, \dots, I_N)$. Este conjunto de coordenadas recibe el nombre de

³Esta propiedad puede formularse afirmando que $\lim_{t \rightarrow \infty} N(t)/t \rightarrow \infty$, donde $N(t)$ es el número de operaciones necesarias para obtener una solución aproximada con precisión ϵ independiente del tiempo.

⁴Se dice que dos funciones F y G están en involución si su corchete de Poisson es nulo $\{F, G\} = 0$, donde

$$\{F, G\} = \sum_i \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} - \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i}.$$

variables acción-ángulo y constituye la forma canónica de describir los sistemas integrables; con ellas, las ecuaciones de movimiento se reducen a:

$$\frac{dI_j}{dt} = 0; \quad (2.3)$$

$$\frac{d\phi_j}{dt} = \omega_j(I_1, \dots, I_N). \quad (2.4)$$

La nomenclatura que acabamos de introducir (variables acción-ángulo) no es en absoluto arbitraria. El hecho de que todas las trayectorias estén restringidas a un toro N -dimensional permite definir un conjunto de coordenadas (ϕ_1, \dots, ϕ_N) , que varían entre 0 y 2π (como un ángulo) y que constituyen una base del toro. Estas nuevas coordenadas pueden considerarse como posiciones en el conjunto de coordenadas canónicas $(I_1, \dots, I_N; \phi_1, \dots, \phi_N)$; sus coordenadas conjugadas (que son, por lo tanto, momentos) son precisamente las variables acción (I_1, \dots, I_N) .

Para comprender mejor esta terminología, considérese que sólo una de los N ángulos varía mientras los $N - 1$ restantes se mantienen constantes; la acción del sistema a lo largo de esta curva es

$$S_1 = \int_0^{2\pi} I_1 d\phi_1 = 2\pi I_1. \quad (2.5)$$

Esta misma trayectoria forma una curva cerrada C_1 en el espacio de fases original del sistema, de manera que la acción también puede escribirse

$$S_1 = \int_{C_1} pdq. \quad (2.6)$$

De la comparación entre estas dos últimas ecuaciones y de generalizar el razonamiento para las N variables ángulo resulta evidente que

$$I_j = \frac{1}{2\pi} \int_{C_j} pdq. \quad (2.7)$$

Así pues, el nombre de variables acción-ángulo se justifica por la interpretación geométrica de estas coordenadas.

Una vez que se ha escrito el hamiltoniano en función de las variables acción-ángulo, la integración de las ecuaciones del movimiento es trivial. Al transformar las trayectorias resultantes a las coordenadas originales se aprecia que cada una de las variables ángulo da lugar a una trayectoria periódica con periodo 2π . El movimiento de un sistema integrable es, por lo tanto, multiperódico.

2.1.3. De la integrabilidad al caos: teorema KAM

Los sistemas integrables pueden considerarse excepciones en la naturaleza. Si consideramos un hamiltoniano cualquiera que pueda expresarse como un desarrollo en serie de sus posiciones y momentos (nos restringiremos a dos grados de libertad por simplicidad)

$$H(x, y; p_x, p_y) = \sum C_{ijkl} x^i x^j p_x^l p_y^k, \quad (2.8)$$

es posible demostrar que en cualquier entorno de H existe un hamiltoniano H' no integrable. En un lenguaje más matemático, esta propiedad consiste en que los hamiltonianos no integrables forman un conjunto denso en el de los hamiltonianos analíticos. Los hamiltonianos integrables, por el contrario, no forman un conjunto denso en ese sentido.

A la vista de lo anterior, resulta evidente que una pequeña perturbación en un hamiltoniano integrable ha de conllevar la pérdida de la integrabilidad. No obstante, es también igualmente lógico que una perturbación muy pequeña no puede transmutar por completo el comportamiento del sistema, sino que el paso de la regularidad del movimiento integrable a la complejidad del movimiento caótico ha de producirse de una forma gradual. El estudio de cómo se produce este paso en función de la intensidad de la perturbación es lo que constituye el teorema KAM, quizá el más importante en la teoría del caos. A pesar de esta simplicidad conceptual, la formulación del teorema KAM no es en absoluto sencilla; al contrario, el aparato matemático necesario es enorme y hay un sinfín de dificultades técnicas. Lo que se expone a continuación no es más que el resultado principal de este teorema, obviando todas estas dificultades.

Considérese un sistema integrable $H_0(I_1, \dots, I_N)$ que se perturba ligeramente según

$$H = H_0(I_1, \dots, I_N) + \epsilon H_1(I_1, \dots, I_N; \phi_1, \dots, \phi_N), \quad (2.9)$$

de modo que el sistema H es no integrable y se aleja de H_0 según crece la perturbación ϵ .

Teorema KAM. Si la perturbación es suficientemente pequeña, la mayor parte de los toros invariantes no desaparecen, sino que se deforman ligeramente; la mayoría de las trayectorias se encuentran en estos toros y constituyen un movimiento multiperiodico con un número de frecuencias independientes igual al número de grados de libertad del sistema. Se dice que estos toros invariantes remanentes son mayoría porque la medida del conjunto complementario a su unión es pequeña cuando la perturbación es pequeña [2].

El teorema KAM da una pauta genérica de cómo el sistema transita de la integrabilidad al caos. Según va creciendo la intensidad ϵ de la perturbación, el volumen ocupado por los toros va disminuyendo; al mismo tiempo, las regiones que no pertenecen a esos toros van haciéndose más importantes. El teorema KAM también

indica cómo se van destruyendo los toros y cuál es la jerarquía de su desaparición: como ley general, los toros más resistentes son aquellos para los que la relación entre sus frecuencias es más irracional; el último toro invariante es aquel cuya relación de frecuencias más se aproxima a la razón áurea [$\alpha = (\sqrt{5} - 1)/2$] (para más detalles véase, por ejemplo, [5]).

2.1.4. Fenomenología del movimiento caótico

Una vez que todos los toros invariantes han desaparecido, las trayectorias del sistema no están restringidas a una variedad del espacio de fases; el sistema se comporta de forma complicada e impredecible y presenta una fenomenología característica. A continuación se resumen los aspectos más importantes de esta fenomenología.

Además de en la mecánica newtoniana, el caos aparece en otros muchos sistemas, entre los que destacan algunos algoritmos matemáticos sencillos, como los sistemas dinámicos discretos, que consisten en una secuencia de números $\{x_1, x_2, \dots, x_n, \dots\}$ generada a partir de una relación

$$x_{n+1} = F_r(x_n), \quad (2.10)$$

donde $F(x)$ es una función y r un parámetro libre. Estos sistemas son una versión discreta de los sistemas dinámicos continuos

$$\frac{dx}{dt} = F(x, t; r) \quad (2.11)$$

que gobiernan la mayoría de los sistemas físicos.

En esta sección hemos escogido el mapa logístico, definido según

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n), \quad (2.12)$$

donde $0 < x_n < 1 \forall n$ y $r \in (1, 4)$, para ilustrar la fenomenología del caos. Este sistema se caracteriza por un comportamiento caótico para $3.57 < r < 4$, ya que para este conjunto de parámetros existe una cantidad no numerable de condiciones iniciales x_0 que dan lugar a trayectorias aperiódicas. El lector interesado en más detalles sobre este sistema puede consultar [6].

Sensibilidad a condiciones iniciales

Una de las características más conocidas del movimiento caótico es la extrema sensibilidad a las condiciones iniciales. Esta propiedad es conocida popularmente como *efecto mariposa*; E. N. Lorenz acuñó este nombre al aludir hiperbólicamente al efecto que puede producir el imprevisible batir de las alas de una mariposa como perturbación de las condiciones iniciales. La forma rigurosa de abordar este fenómeno consiste en estudiar cómo se separan con el tiempo dos trayectorias que están

infinitamente próximas en el instante inicial. En los sistemas caóticos esta separación es exponencial, de manera que un pequeño error se amplifica de tal forma que al cabo de cierto tiempo la predicción es imposible.

A pesar de la popularidad del efecto mariposa, la aparición de este fenómeno no es suficiente para que el sistema pueda considerarse caótico; un sistema regular cuyo espacio de fases se agrande con el tiempo podría presentar una fenomenología muy parecida. Para que aparezca el caos es necesario, además, que se produzca el fenómeno de *mixing*⁵, que consiste en que las trayectorias vuelven a aproximarse si se consideran intervalos de tiempo lo bastante largos. La explicación de este fenómeno es sencilla: al ser el espacio de fases finito, dos trayectorias no pueden alejarse entre sí indefinidamente; al cabo de un cierto tiempo, las trayectorias acaban aproximándose de nuevo de forma más o menos aleatoria.

Considérese un sistema discreto $x_{n+1} = f(x_n)$ y dos condiciones iniciales x_0, y_0 muy próximas, tales que $y_0 = x_0 + \epsilon$. Si el sistema es caótico, al cabo de n iteraciones la separación de las trayectorias correspondientes a estas condiciones iniciales ha crecido de forma exponencial, según

$$d = |f^n(x_0 + \epsilon) - f^n(x_0)| = \epsilon \exp(n\lambda(x_0)), \quad (2.13)$$

donde $f^n(x_0)$ indica la n -ésima iteración del sistema a partir de la condición inicial x_0 .⁶

En la figura 2.1 se representa en escala logarítmica la separación de dos trayectorias inicialmente separadas por $\epsilon = 10^{-8}$ en el mapa logístico caótico; junto a ella se representa también la distancia entre dos números generados a la azar con una distribución uniforme en el intervalo $(0, 1)$. Este sencillo experimento numérico ilustra a la perfección el efecto mariposa y el fenómeno de mixing. En las primeras iteraciones, la distancia entre las dos trayectorias crece exponencialmente hasta un valor máximo; a partir de ese momento, el crecimiento se estanca y la evolución de la distancia es muy parecida a la distancia entre dos variables aleatorias independientes. La principal conclusión que se obtiene de este experimento es que la predicción resulta imposible al cabo de un cierto número de iteraciones, ya que un pequeño error en la determinación de las condiciones iniciales conlleva una completa incertidumbre en la evolución posterior del sistema.

El parámetro $\lambda(x_0)$ de la ecuación (2.13) se denomina exponente de Lyapunov y caracteriza la separación exponencial de las trayectorias. A partir de la expresión

⁵Este término puede traducirse al español como *mezcla*. Hemos decidido no traducirlo en el texto porque el término *mixing* se utiliza para clasificar los sistemas caóticos en diferentes tipos: sistemas ergódicos, sistemas mixing y sistemas K. Este mismo fenómeno se conoce también con el nombre de *transitividad topológica* [7]

⁶Este resultado sólo es válido para n relativamente pequeño, es decir, para distancias d menores que el tamaño característico del espacio de fases; en caso contrario se observa el fenómeno de mixing.

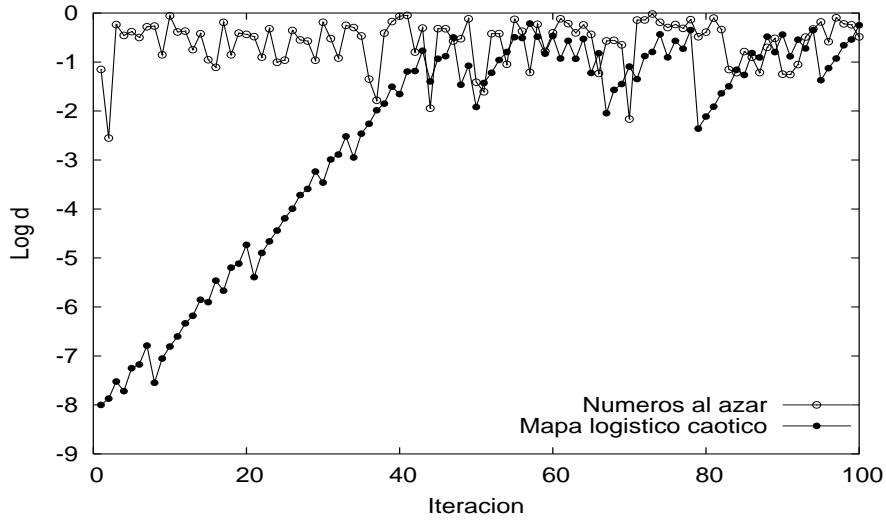


Figura 2.1: Comparación de la evolución de la distancia entre dos trayectorias separadas inicialmente por $\epsilon = 10^{-8}$ en un mapa logístico caótico con la distancia entre dos números generados al azar en el intervalo $(0, 1)$

anterior puede probarse que

$$\lambda(x_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \left(\left| \frac{df^n(x_0)}{dx_0} \right| \right). \quad (2.14)$$

El exponente de Lyapunov es uno de los parámetros más característicos del caos; de hecho, es bastante habitual determinar si un sistema es caótico mediante el cálculo del exponente de Lyapunov⁷. En los sistemas con N grados de libertad hay N exponentes de Lyapunov, cada uno de los cuales está asociado a una dirección propia según la cual se alejan exponencialmente las trayectorias. No obstante, el exponente mayor es el que tiene un efecto dominante; es éste el que se utiliza para caracterizar el caos.

En el caso del mapa logístico, al ser un sistema discreto unidimensional, el cálculo según la ecuación (2.14) es muy sencillo; en los sistemas físicos reales, sin embargo, el mismo cálculo puede llegar a ser muy complicado. En la figura 2.2 se representa el exponente de Lyapunov de este sistema cuando $r \in (3, 4)$, calculado según la ecuación (2.14); se ha dibujado una línea horizontal con trazo discontinuo en $\lambda = 0$ para discernir con más facilidad las regiones donde hay caos. La curva $\lambda(r)$ muestra que para valores $r > 3.57$ el sistema es caótico, ya que en esta zona el exponente de Lyapunov es mayoritariamente positivo. El hecho de que existan pequeñas regiones con $\lambda < 0$ en el conjunto $r \in (3.57, 4)$ se entiende tras un análisis detallado de lo

⁷La teoría presentada en las secciones anteriores define perfectamente el caos en sistemas hamiltonianos, pero resulta muy complicada de aplicar en la práctica.

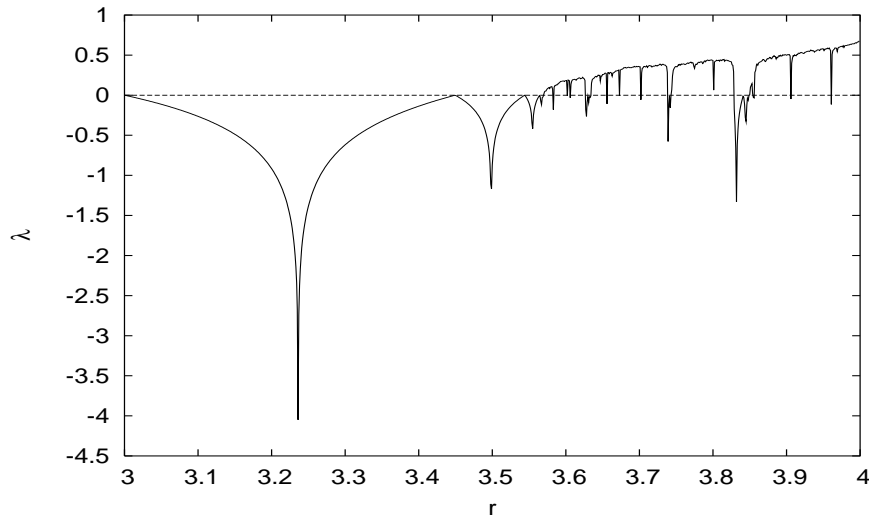


Figura 2.2: Exponente de Lyapunov en un mapa logístico para $r \in (3, 4)$ calculado según la ecuación (2.14)

que sucede en él. En [6] se muestra que existen pequeñas ventanas Δr en las cuales hay ciclos estables de periodo k ; por ejemplo, la región con $\lambda < 0$ que aparece en torno a $r = 3.83$ se corresponde con una ventana en la que, bien el ciclo de periodo 3, bien uno de sus armónicos, es estable.

Información y predictibilidad

En los sistemas caóticos, las trayectorias se distribuyen por todo el espacio de fases, sin formar estructuras sencillas: puede decirse que el movimiento caótico es un movimiento desordenado. En termodinámica, el grado de desorden del sistema se mide por medio de la entropía, que indica el número de microestados compatibles con el estado macroscópico; es razonable pensar que el desorden asociado al caos puede cuantificarse de forma parecida.

Kolmogorov fue el primero que utilizó el concepto de entropía para determinar la intensidad del caos. Para ello definió un indicador, la entropía de Kolmogorov o entropía K , que mide la pérdida de información que experimenta el sistema (en otras palabras, el aumento de desorden) por unidad de tiempo y que se calcula promediando a todas las trayectorias posibles, de manera que representa al sistema completo y no a un subconjunto de sus trayectorias.

Considérese una trayectoria de un sistema físico cualquiera $x(t)$. Si dividimos el espacio de fases en celdas de tamaño ϵ , podemos asociar a cada trayectoria una secuencia i_1, \dots, i_n que indica que en el tiempo $t = k\tau$ (τ es el tiempo de muestreo) el sistema se encuentra en la celda k . Si P_{i_1, \dots, i_n} es la probabilidad de que se dé esta

secuencia, la cantidad

$$K_n = - \sum_{i_1, \dots, i_n} P_{i_1, \dots, i_n} \log P_{i_1, \dots, i_n} \quad (2.15)$$

es proporcional a la información necesaria para determinar la trayectoria en grano grueso conocidos i_1, \dots, i_n ; $K_{n+1} - K_n$ es la información adicional necesaria para predecir i_{n+1} a partir de los datos anteriores, es decir, la pérdida de información que sufre el sistema al transcurrir el tiempo. A partir de aquí, la entropía K se define como

$$K = \lim_{\tau \rightarrow 0} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n\tau} \sum_0^{n-1} (K_{n+1} - K_n). \quad (2.16)$$

En el caso de sistemas con un grado de libertad, K coincide con el exponente de Lyapunov si este es constante; en sistemas mayores, la pérdida de información es debida sólo a los exponentes positivos. Para los sistemas integrables, $K = 0$; si hay caos determinista, $0 < K < \infty$; y si se trata de un proceso estocástico, $K = \infty$.

Además de indicar el grado de desorden del sistema, la entropía K sirve para estimar el tiempo máximo para el cual es posible predecir el movimiento de un sistema caótico. Si $K > 0$, la información contenida en las condiciones iniciales se pierde en un cierto tiempo a partir del cual no es posible predecir. Una buena estimación de este tiempo es

$$t_p \sim \frac{1}{K} \log \frac{L}{l} \quad (2.17)$$

donde L es el tamaño de la región accesible del espacio de fases y l la precisión inicial.

El principal inconveniente de este indicador estriba en la dificultad de su cálculo, que es muy elevada incluso para sistemas sencillos como el mapa logístico.

El espectro de Fourier

Según se vio en las secciones anteriores, el movimiento de un sistema integrable es periódico o multiperíodico, mientras que el de un sistema caótico no presenta ningún tipo de regularidad; por esa razón, el estudio de una trayectoria $x(t)$ en espacio de Fourier es especialmente interesante. No obstante lo anterior, las propiedades del espectro de Fourier no suelen considerarse tan características del caos como la sensibilidad a las condiciones iniciales o la entropía de Kolmogorov. Por otro lado, el análisis de Fourier se aplica a multitud de fenómenos caracterizados por una magnitud que varía estocásticamente (al menos en apariencia) con el tiempo, sin que eso implique la existencia de un hamiltoniano no integrable subyacente. Incluimos esta sección para que el lector aprecie la conexión entre el caos determinista y el análisis de series temporales, herramienta habitual en el estudio de fenómenos complejos

alejados de la mecánica hamiltoniana. En el apéndice B se presenta una explicación detallada del significado y la forma de implementar la transformada de Fourier; el lector interesado en los detalles técnicos puede remitirse a dicho apéndice.

Un movimiento periódico queda caracterizado en el espacio de Fourier por una frecuencia ω , que es proporcional a la inversa del periodo $\omega = 2\pi/T$; su espectro de Fourier consiste en líneas centradas en ω y en sus armónicos $m\omega$. El caso de un movimiento multiperiodico es ligeramente más complicado: existen varias frecuencias ω_i correspondientes a cada uno de los periodos, y su espectro de Fourier puede contener todas las frecuencias del tipo

$$\omega = \sum_i m_i \omega_i, \quad (2.18)$$

donde cada m_i representa un número entero. El problema se hace aún más complicado si la razón entre las diferentes ω_i es irracional, ya que en ese caso los números ω forman un conjunto denso en la recta real positiva y puede haber una frecuencia arbitrariamente cerca de cualquier número positivo. Afortunadamente, en los casos dinámicos de interés sólo unas pocas frecuencias ω_i son significativas y su amplitud decrece exponencialmente al aumentar la frecuencia.

En el caso de los sistemas caóticos, el movimiento no presenta ninguna regularidad: es aperiódico. El espectro de frecuencias de este tipo de señales es continuo: no presenta picos distinguibles como en el caso anterior. No obstante, a veces es muy difícil distinguir de forma práctica entre un movimiento multiperiodico y uno aperiódico; la distinción se hace tanto más difícil conforme aumenta el número de grados de libertad del sistema.

En la figura 2.3 se representa el espectro de potencias⁸ para cuatro trayectorias del mapa logístico correspondientes a cuatro valores diferentes del parámetro r . Las tres primeras se han escogido con un valor de r que dé lugar a trayectorias periódicas de periodos $T = 4$, $T = 8$ y $T = 16$ respectivamente; en ellas se observa que el espectro de Fourier es muy sencillo, con picos correspondientes a frecuencias $\omega = 2\pi/T$. La cuarta trayectoria corresponde a un valor de r para el cual el sistema es caótico; en este caso, el espectro de Fourier no está compuesto por picos aislados, sino que forma un continuo en el que es imposible distinguir un patrón sencillo.

2.2. Signos del caos en mecánica cuántica

Como se ha visto en la sección precedente, el caos está bien formalizado en el ámbito de la mecánica clásica: la estructura matemática de la mecánica newtoniana

⁸Esta magnitud es igual al módulo al cuadrado de la transformada de Fourier. Se habitualmente para representar el espectro de Fourier porque es una magnitud real, mientras que la transformada de Fourier es compleja. Para más detalles, veáanse el capítulo 3 y el apéndice B.

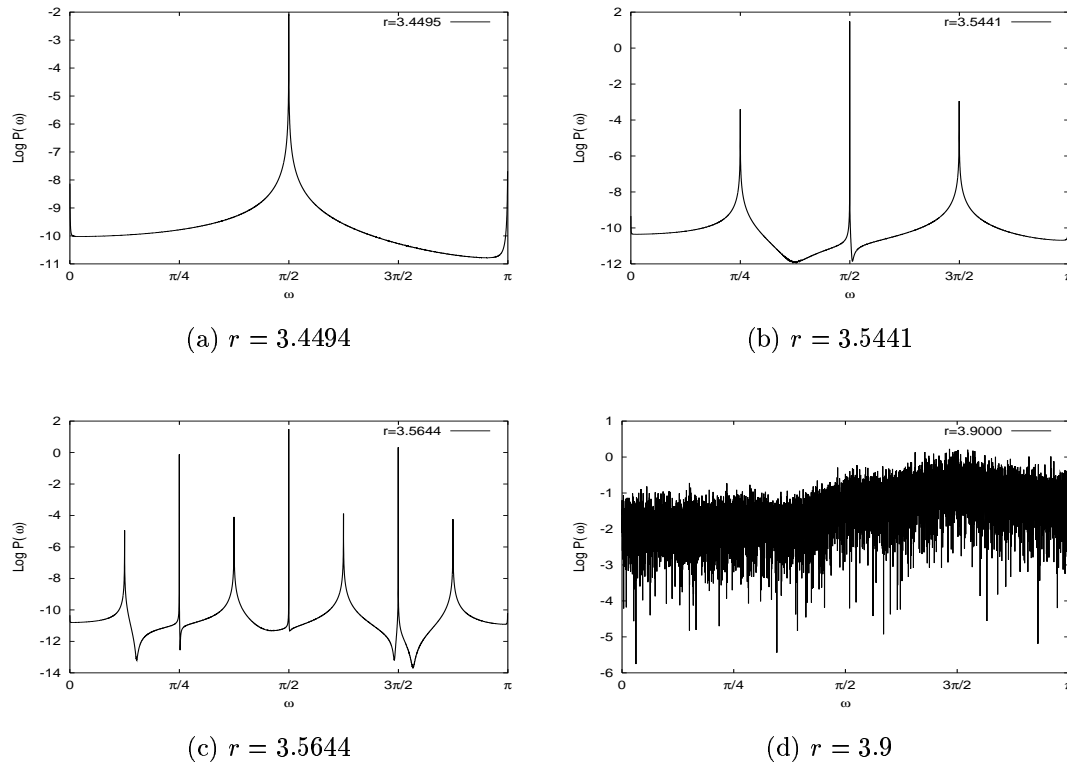


Figura 2.3: Espectro de potencias del mapa logístico para 4 valores de r , correspondientes a movimiento periódico con periodos $T = 4$, $T = 8$, $T = 16$ y a movimiento caótico. Se dibuja en escala logarítmica para mayor claridad.

permite una formulación precisa y da lugar a una rica fenomenología que lo caracteriza. Sabemos, sin embargo, que la mecánica clásica es sólo una aproximación a las leyes exactas de la naturaleza: una aproximación que funciona a la perfección en escalas macroscópicas, pero no en otras más pequeñas. Para describir con corrección lo que ocurre en estas últimas escalas, que caracterizan, por ejemplo, los movimientos atómicos y nucleares, es necesario recurrir a una teoría más completa: la mecánica cuántica. La visión de la realidad que proporciona esta teoría es muy diferente a la que da lugar la mecánica clásica, de manera que la rica fenomenología del mundo macroscópico no puede trasladarse al mundo microscópico mediante un simple cambio de escala. A pesar de ello, la mecánica cuántica ha de ir aproximándose a la mecánica clásica según aumenta el tamaño del sistema, de forma que toda la fenomenología clásica tiene que emanar de un modo o de otro del mundo cuántico; en particular, el caos y todas sus manifestaciones tienen que estar escondidos en algún lugar del mundo microscópico.

2.2.1. Integrabilidad en mecánica cuántica

A priori, la manera más sencilla de definir el caos en mecánica cuántica consistiría en trasladar a esta teoría los conceptos clásicos. Al igual que en mecánica clásica, un sistema cuántico queda descrito por un hamiltoniano que depende en general de posiciones y momentos $H(q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N)$. La interpretación cuántica de este hamiltoniano es muy diferente a la interpretación clásica: cada una de sus coordenadas es un operador que actúa sobre una función de onda; el estado del sistema no se encuentra resolviendo unas ecuaciones de movimiento, sino una ecuación de ondas (la ecuación de Schrödinger); la información del sistema no está en sus trayectorias $x(t)$, sino en su función de ondas $\Psi(q, p)$. No obstante, las similitudes entre ambas teorías son suficientes como para trasladar los conceptos de una a la otra. En particular, es posible definir una constante del movimiento como un operador \hat{F} que no varía con el tiempo $d\hat{F}/dt = 0$, y el corchete de Poisson tiene su equivalente en el conmutador $\{, \} \rightarrow i/\hbar[,]$. A partir de todas estas equivalencias, parece posible trasladar la definición clásica de integrabilidad a la mecánica cuántica de la siguiente manera: diremos que un sistema es integrable si existen N operadores independientes $\hat{F}_1, \dots, \hat{F}_N$ que son constantes del movimiento $d\hat{F}_i/dt = 0 \forall i$ y que están en involución, esto es que $[\hat{F}_i, \hat{F}_j] = 0 \forall i, j$ [8].

La definición que se acaba de dar es consistente y no da lugar a ambigüedades: tanto la definición de constante de movimiento como el concepto de involución existen en el marco de la mecánica cuántica⁹. Sin embargo, una tercera condición implícita en la definición clásica de la integrabilidad, la independencia funcional de las N constantes del movimiento, carece de sentido en mecánica cuántica¹⁰. Esta dificultad hace que sea imposible separar los sistemas cuánticos en dos conjuntos disjuntos con diferentes propiedades (integrables y no integrables); el caos en mecánica cuántica no puede definirse de manera axiomática con nitidez.

La imposibilidad de definir la independencia funcional de las constantes del movimiento se manifiesta en una serie de contradicciones que ilustran muy bien las dificultades que aparecen al tratar de definir el caos en mecánica cuántica. Considérese un hamiltoniano que no contenga productos de operadores que no conmutan entre sí (estos hamiltonianos pueden cuantizarse sin ambigüedades). Es posible probar que [8]:

- Sea $H(q, p)$ el análogo cuántico a un sistema clásico no integrable. En tal caso,

⁹La interpretación de estos conceptos es diferente a la que se da en mecánica clásica. El hecho de que un operador conmute con otro indica que ambos operadores pueden ser medidos al mismo tiempo; no hay relación alguna con la interpretación geométrica de la involución en mecánica clásica.

¹⁰Un teorema debido a Von Neumann [9] asegura que, dado un conjunto cualquiera de operadores hermíticos Q_1, \dots, Q_N que conmutan, siempre existe un operador \mathcal{Q} tal que cada uno de los operadores Q_i es una función de él $Q_i = f_i(\mathcal{Q})$.

siempre existe un número de constantes del movimiento \hat{F}_i que cumplen los requisitos de la definición de integrabilidad que se acaba de dar. En consecuencia, dicho sistema sería cuánticamente integrable.

- Sea $H(q, p)$ el análogo cuántico a un sistema clásico integrable. En tal caso, siempre existe una constante del movimiento \hat{I} tal que las N constantes \hat{F}_i son función de \hat{I} . Así pues, dado un sistema cuántico con N grados de libertad, siempre es posible decir que toda la información del sistema está codificada en una sola constante del movimiento \hat{I} , de manera que no tiene sentido buscar otras $N - 1$ constantes que garanticen la integrabilidad. Desde ese punto de vista, el análogo cuántico de un sistema clásico integrable sería caótico.

A pesar de los dos resultados anteriores, la comunidad científica no termina de ponerse de acuerdo a la hora de definir (o negar) el concepto de integrabilidad en mecánica cuántica. Por un lado existen trabajos que complementan los dos resultados que acabamos de exponer, bien negando la posibilidad de discernir entre sistemas integrables y no integrables, bien afirmando que la mecánica cuántica es siempre (bajo unas condiciones muy genéricas) integrable. Estos últimos trabajos se basan en considerar que la mecánica cuántica de Schrödinger es equivalente geoméricamente a un sistema hamiltoniano clásico con un espacio de fases de dimensión infinita [10]. Partiendo de esta equivalencia se puede probar que bajo condiciones muy generales el espacio de fases resultante tiene la estructura de un sistema integrable¹¹, de modo que se puede concluir que la mecánica cuántica es globalmente integrable. No obstante, y a pesar de la consistencia de esta definición, quedan aún algunos problemas por resolver; por ejemplo, no parece posible afirmar que un sistema integrable infinito posee una entropía de Kolmogorov nula.

Por otro lado, hay muchos autores que manifiestan un punto de vista crítico con respecto a la imposibilidad de definir la integrabilidad en mecánica cuántica y que proponen criterios alternativos para definirla. De entre todas sus propuestas destacan las siguientes:

- Partiendo del concepto de conjunto completo de observables que conmutan (CCOC) y de las propiedades matemáticas de los espacios de Hilbert, es posible definir los conceptos de grado de libertad dinámico y espacio de fases desde un punto de vista puramente cuántico. Esta definición da lugar a un espacio de fases cuántico finito (en contraposición al espacio infinito propuesto en [10]) y permite encontrar un criterio cuántico para la integrabilidad: un sistema

¹¹El concepto de integrabilidad presentado en la sección anterior es válido solamente para espacios de fases con dimensión finita. No obstante, esta misma definición se puede trasladar a espacios de dimensión infinita desde un punto de vista geométrico: se considera que un sistema infinito es integrable si su espacio de fases está fibrado en toros o cilindros de dimensión infinita [10].

cuántico es integrable si posee alguna simetría dinámica [11]; la ruptura de estas simetrías conlleva la pérdida de la integrabilidad.

- La construcción de un análogo cuántico a las transformaciones canónicas que permiten escribir el hamiltoniano en función de variables acción-ángulo [12] permite definir otra noción de integrabilidad cuántica: un hamiltoniano $H(q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N)$ es integrable si existe una transformación canónica que permite escribirlo en función de N acciones¹² J_i : $H = H(J_1, \dots, J_N)$. Esta definición se ha aplicado con éxito a sistemas de espines [13].
- A pesar de los resultados expuestos en [8], que imposibilitan la extensión directa del concepto de integrabilidad clásica a la mecánica cuántica, no siempre es posible obtener tantas constantes de movimiento como grados de libertad en un número finito de pasos (es decir, sin diagonalizar explícitamente el hamiltoniano). Esto permite establecer un criterio práctico de integrabilidad cuántica: un sistema cuántico se considera integrable cuando es posible construir explícitamente un CCOC a base de constantes del movimiento. Este criterio se ha utilizado con éxito en sistemas finitos con interacciones de pairing [14].

2.2.2. Fenomenología del caos en mecánica cuántica

De lo expuesto en el apartado anterior se puede concluir que no existe una definición cuántica de integrabilidad análoga a la que hay en mecánica clásica. No obstante, también es posible tratar de definir el caos en función de su fenomenología: se puede decir que un sistema es caótico si presenta propiedades como la sensibilidad a condiciones iniciales¹³. Veremos a continuación que tampoco es fácil definir el caos en mecánica cuántica de esta manera.

Sensibilidad a condiciones iniciales

Considérese un sistema cuántico cualquiera, por ejemplo uno cuyo análogo clásico sea no integrable. La evolución temporal de dicho sistema queda determinada por su función de ondas $\Psi(t)$, que está regida por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(t) = H(t) \Psi(t). \quad (2.19)$$

¹²El concepto de “acción” en mecánica cuántica se entiende como una generalización del mismo concepto en mecánica clásica.

¹³De hecho, este es el criterio que se usa en la práctica para determinar si un sistema clásico es caótico. Nótese que el no ser capaces de encontrar un número suficiente de constantes del movimiento no implica la no existencia de éstas.

En general, el hamiltoniano $H(t)$ puede depender explícitamente del tiempo. En el caso de que esto no sea así, el sistema se denomina conservativo y su evolución temporal queda determinada por

$$\Psi(t) = \exp(-iH(t - t_0)/\hbar) \Psi(t_0), \quad (2.20)$$

donde t_0 representa el instante inicial y $\Psi(t_0)$ el estado del sistema en dicho instante; toda la información disponible sobre la trayectoria $x(t)$ está codificada en la función de ondas $\Psi(t)$.

Una vez determinadas las ecuaciones de evolución del sistema, el siguiente paso para buscar el caos consiste en comparar dos trayectorias que se encuentran infinitamente próximas en el instante inicial $x_0, y_0 = x_0 + \epsilon$. Sin embargo, la propia estructura de la mecánica cuántica descarta esa posibilidad: el principio de incertidumbre $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ impide medir con total precisión el momento y la posición de las partículas en todo instante de tiempo, de modo que no es posible definir un límite $\epsilon \rightarrow 0$ como se hace en mecánica clásica. Así pues, la definición del caos a partir de la separación exponencial de las trayectorias no es posible en mecánica cuántica: ni tiene sentido físico el concepto de trayectoria tal y como se entiende en mecánica clásica, ni es posible considerar dos condiciones iniciales infinitamente próximas, tal y como se necesita para definir los exponentes de Lyapunov.

Otra posibilidad pasa por estudiar la sensibilidad a condiciones iniciales directamente a partir de la función de ondas¹⁴. Sin embargo, otra vez las leyes de la mecánica cuántica imposibilitan la definición del caos a partir de la sensibilidad a las condiciones iniciales: el operador evolución temporal es unitario, de manera que si $\Psi(t_0)$ y $\Phi(t_0)$ son dos condiciones iniciales cualquiera, su grado de solapamiento (es decir, su proximidad o su nivel de coincidencia) se mantiene constante a lo largo del tiempo

$$\langle \Psi(t_0) | \Phi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t) | \Phi(t) \rangle \quad \forall t, \quad (2.21)$$

con independencia de cuál sea el hamiltoniano del sistema.

La conclusión es, por lo tanto, que no se puede definir el caos en mecánica cuántica a partir de la extrema sensibilidad a las condiciones iniciales. Un ejemplo que ilustra esta conclusión puede encontrarse en [15].

Sensibilidad frente a perturbaciones

A pesar del contundente resultado de la sección anterior, aún existen alternativas para definir el caos en mecánica cuántica a partir de una fenomenología semejante a la que existe en mecánica clásica; en particular, es posible estudiar la estabilidad

¹⁴La función de ondas no se puede medir directamente, pero se puede reconstruir a partir de la información proporcionada por otros observables. Además, sí es posible estudiarla desde un punto de vista teórico.

el movimiento en función de una pequeña perturbación en el hamiltoniano[16]. La validez de esta alternativa a la definición clásica en función de la sensibilidad a las condiciones iniciales está justificada porque en mecánica clásica la estabilidad de las trayectorias frente a perturbaciones en el hamiltoniano es equivalente a la sensibilidad a perturbaciones sobre las condiciones iniciales: los sistemas integrables son estables frente a este tipo de perturbaciones; los sistemas caóticos presentan una inestabilidad exponencial.

En mecánica cuántica, la sensibilidad frente a perturbaciones se mide mediante la *fidelidad*¹⁵ del movimiento. Considérese un operador de evolución temporal U y el mismo operador ligeramente perturbado $U_\delta = U \exp(-iA\delta)$, donde A es un operador hermítico y δ es un parámetro pequeño [17]. La influencia de la pequeña perturbación δ se mide mediante el solapamiento $\langle \Psi_\delta(t) | \Psi(t) \rangle$, donde $\Psi(t)$ y $\Psi_\delta(t)$ son el resultado de la evolución temporal del mismo estado inicial $\Psi(t_0)$ con U u U_δ , respectivamente. La fidelidad se define

$$F(t) = \langle U_\delta^{-t} U^t \rangle, \quad (2.22)$$

donde el valor medio se puede calcular sobre un estado puro o sobre todos los estados iniciales posibles. Esta cantidad tiene un gran interés por muy diversos motivos, entre los que destacan: la medida de la estabilidad el movimiento caótico; la medida de la irreversibilidad de las fases cuánticas (que se conoce como *Eco de Loschmidt*¹⁶); y la medida de la pérdida de coherencia de fase en computación cuántica (véase [17] y las referencias que allí se incluyen).

La fidelidad del movimiento se ha mostrado como un parámetro muy útil a la hora de establecer la fenomenología del movimiento caótico en mecánica cuántica [18]; en particular, se ha mostrado que bajo ciertas condiciones los sistemas caóticos muestran un decaimiento exponencial de este parámetro cuyo ritmo coincide con el exponente de Lyapunov medio del sistema clásico análogo. No obstante, en [17] se muestra que el decaimiento de la fidelidad es más rápido en los sistemas integrables que en los caóticos, o, en otras palabras, que el movimiento en el espacio de Hilbert es menos estable en los sistemas regulares que en los caóticos; concretamente, se encuentra que en los sistemas *mixing* el decaimiento es exponencial, mientras que en los integrables es Gaussiano.

Así las cosas, todo parece indicar que la sensibilidad frente a perturbaciones del hamiltoniano sólo da lugar a un éxito parcial como definición del caos en mecánica cuántica. La investigación al respecto aún está abierta.

¹⁵Este término es una traducción literal del inglés *fidelity*.

¹⁶Traducción literal de *Loschmidt Eco*.

2.2.3. Trazas del caos en observables cuánticos

A la vista de los resultados de las secciones anteriores, queda claro que no se puede caracterizar el caos en mecánica cuántica a base de una fenomenología análoga a la clásica. Sin embargo, la mecánica clásica emerge de la mecánica cuántica cuando el sistema es suficientemente grande; el caos tiene que aparecer en algún lugar del mundo cuántico. En esta sección repasamos brevemente las trazas del caos en algunos observables cuánticos, como el módulo al cuadrado de la función de ondas o el espectro de energías.

Caos en la función de ondas

Consideremos un sistema clásicamente caótico (un billar con forma de estadio¹⁷, por ejemplo) y tratemos de medir (o calcular mediante simulación numérica) el módulo al cuadrado de la función de ondas, es decir, la probabilidad de encontrar a la partícula en una determinada región del espacio. Como las descripciones cuántica y clásica de la realidad son completamente diferentes, es razonable esperar que no haya una relación directa entre la trayectoria clásica de la partícula y la densidad de probabilidad cuántica; sin embargo, según nos aproximamos al límite semiclásico ($\hbar \rightarrow 0$ o $E \rightarrow \infty$) la mecánica cuántica ha de ir pareciéndose cada vez más a la mecánica clásica, de manera que si realizáramos el mismo experimento a muy alta energía la densidad de probabilidad resultante debería reflejar de algún modo la dinámica clásica del sistema. Heller [19] hizo por primera vez este cálculo en un billar con forma de estadio y obtuvo un resultado sorprendente: existen funciones de onda cuya amplitud es máxima cerca de órbitas periódicas clásicas inestables (una partícula clásica que empezara a moverse en una de estas órbitas se alejaría de ella hasta recorrer todo el sistema tras una mínima perturbación).

Este extraño efecto que acabamos de describir recibe el nombre de *cicatriz* (se dice que la función de ondas está cicatrizada según las órbitas periódicas clásicas inestables) y se ha descubierto en multitud de sistemas cuánticos con análogo caótico. A primera vista parece un fenómeno contrario a la intuición; no se comprende con facilidad que la mecánica cuántica haga prevalecer las órbitas clásicas inestables. El estudio detallado de estas cicatrices ha permitido, sin embargo, encontrar las trazas del caos en mecánica cuántica: junto con las propiedades del espectro de energías ha revelado la importancia que tienen la aproximación semiclásica y las órbitas periódicas del análogo clásico.

¹⁷Un billar consiste en una partícula que rebota elásticamente con las paredes de un contorno cerrado; cuánticamente es una partícula en un pozo de potencial infinito. Los billares son el paradigma del caos en mecánica cuántica. El primer estudio sobre las trazas del caos en funciones de onda se hizo sobre el billar con forma de estadio [19]

Caos en el espectro de energías

La magnitud quizá más representativa y más fácil de medir de un sistema cuántico es el espectro de energías. Al contrario de lo que sucede con la función de ondas, a primera vista no parece posible encontrar una correspondencia entre el espectro de energías de un sistema cuántico y la dinámica de su análogo clásico: en mecánica clásica el sistema puede tener cualquier energía; esta magnitud no es más que un simple parámetro. Sin embargo, la característica más conocida y más universal de lo que se conoce como *caos cuántico*¹⁸, es precisamente el comportamiento estadístico del espectro de energías en función de si el análogo clásico del sistema cuántico es integrable o caótico.

Dado que el análisis del espectro de energías es el tema principal de la presente tesis doctoral, el estudio detallado de las trazas del caos en el espectro de energía se realizará en las siguientes secciones y capítulos. No obstante, destacamos ahora los dos trabajos más importantes: en [22] se estudian las propiedades universales de los sistemas cuánticos cuyo análogo clásico es integrable, y en [23] se hace lo mismo para los sistemas clásicamente caóticos. La conclusión que se colige de estos dos trabajos es que las propiedades estadísticas del espectro de energías son universales y diferentes según la dinámica del análogo clásico sea regular o caótica.

2.3. Cuantización y espectro de energías

El espectro de energías es la magnitud más característica y más fácil de medir de un sistema cuántico; también es el observable más sencillo desde un punto de vista teórico, ya que se obtiene directamente resolviendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. En general, el espectro de un sistema cuántico cualquiera está compuesto de una parte discreta y una parte continua; esta última se alcanza cuando la energía es superior a la energía clásica de escape. A lo largo de la presente tesis doctoral nos vamos a centrar en la parte discreta del espectro, es decir, en los estados ligados. En esta región, el sistema viene determinado por

$$H|\Psi_n \rangle = E_n|\Psi_n \rangle, \quad (2.23)$$

donde H es el hamiltoniano y Ψ_n el autoestado con energía E_n . El espectro de energías del sistema es el conjunto de valores E_n compatibles con la ecuación anterior.

La resolución de la ecuación de Schrödinger proporciona toda la información conocida sobre el sistema, pero no muestra cómo surge la conexión entre el espectro

¹⁸Esta terminología es aún objeto de controversias. En 1989 los científicos más destacados del campo se reunieron para debatir sus características y su terminología; la reunión se hizo bajo el título de “caos y física cuántica” [20]. Al final, el nombre de “caos cuántico” acabó por aceptarse de manera casi universal, descartándose otras alternativas, como *caología cuántica* [21], quizá más significativas.

de energías y el caos en mecánica clásica. En esta sección introducimos ese vínculo y mostramos cómo una de las trazas más nítidas y sencillas del caos en mecánica cuántica está precisamente en el espectro de energías.

2.3.1. Cuantización de sistemas integrables

Anteriormente a la formulación de la ecuación de Schrödinger, la mecánica cuántica se calculaba a partir de la mecánica clásica; la teoría resultante se conoce en la actualidad como *Mecánica Cuántica Antigua*. Uno de los mayores éxitos de esta teoría fue la cuantización de los sistemas integrables, es decir, aquellos cuyas trayectorias tienen un movimiento multiperiodico. Según las reglas de cuantización de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara (SWI) [24], la mecánica cuántica de dichos sistemas consiste fundamentalmente en que las variables acción sólo pueden tomar valores múltiplos de la constante de Planck:

$$I_j = \int_{C_j} pdq = 2\pi\hbar n_j \quad \forall j, \quad (2.24)$$

donde n_j es un número entero. Estas reglas de cuantización establecen un vínculo claro entre la dinámica clásica del sistema y su espectro de energías: las energías accesibles al sistema cuántico (de N grados de libertad) son aquellas que verifican

$$E = H(I_1, \dots, I_N) = H(2\pi\hbar n_1, \dots, 2\pi\hbar n_N). \quad (2.25)$$

Según está expresión, el espectro de energías queda determinado por N números cuánticos correspondientes a N constantes del movimiento.

La formulación de la ecuación de Schrödinger dejó un poco de lado esta teoría; gracias a ella no es necesario conocer la dinámica clásica de un sistema para calcular su espectro de energías. No obstante, la conexión entre la cuantización SWI y la mecánica clásica puede resultar de gran utilidad a la hora de buscar las trazas del caos en el espectro cuántico. Una buena forma de llevar adelante este propósito es considerar que el espectro que se obtiene mediante las reglas SWI es una primera aproximación al espectro real del sistema.

Consideremos un sistema de un grado de libertad cuyo hamiltoniano es $H = p^2/2m + V(x)$ ¹⁹. El espectro de energías y la función de onda de este sistema vienen determinados por

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E \right] \Psi(x) = 0. \quad (2.26)$$

¹⁹El argumento también es válido para hamiltonianos más generales que puedan escribirse en función de variables acción (hamiltonianos integrables). Por simplicidad nos restringiremos aquí al caso con un solo grado de libertad.

Si se introduce un parámetro ϵ tal que la ecuación anterior se convierte en

$$\epsilon^2 \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = Q(x) \Psi(x), \quad (2.27)$$

donde $Q(x) = V(x) - E$, la función de ondas puede calcularse mediante un desarrollo en ϵ

$$\Psi(x) = \exp \left[\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n S_n(x) \right]_{\epsilon=1}, \quad (2.28)$$

donde $S_n(x)$ viene determinado por

$$S_0'(x) = -\sqrt{[Q(x)]}; \quad (2.29)$$

$$2S_0' S_n' + \sum_{j=1}^{n-1} S_j' S_{n-j}' + S_{n-1}'' = 0, \quad (n \geq 1). \quad (2.30)$$

El primer término de este desarrollo se corresponde con las reglas SWI. Incluyendo todos los términos del desarrollo se pueden generalizar dichas reglas de cuantización para reproducir el espectro de energías con exactitud [25]

$$\frac{1}{2i} \oint \sum_{n=0}^{\infty} S_n'(z) dz = K\pi, \quad (2.31)$$

donde la integración se realiza sobre el plano complejo y K es un número entero positivo. Esta forma de calcular el espectro de energías se denomina aproximación WKB y permite establecer un vínculo directo entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica del sistema.

Densidad de estados

La manera más sencilla de incluir toda la información del espectro de energías de un sistema cuántico en una sola magnitud física es mediante la densidad de estados, que contabiliza el número de estados por unidad de energía que hay a una determinada energía E . Para un espectro discreto, la densidad de estados se puede escribir

$$g(E) = \sum_n \delta(E - E_n), \quad (2.32)$$

donde la suma se extiende a todos los niveles del espectro. A partir de esta función se define la densidad acumulada, que contabiliza el número de niveles que hay hasta una energía E

$$N_q(E) = \int_{-\infty}^E dx g(x) = \sum_n \Theta(E - E_n). \quad (2.33)$$

Las dos magnitudes que se acaban de definir son de gran utilidad, ya que permiten comparar directamente el espectro cuántico de energías con una magnitud clásica. A pesar de que en mecánica clásica la energía del sistema no está restringida a unos valores concretos, es posible contar cuántos estados hay con una energía menor que E :

$$N_{cl}(E) = \int d\mathbf{p}d\mathbf{q}\Theta[H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - E], \quad (2.34)$$

donde las negritas indican que \mathbf{p} y \mathbf{q} son vectores N -dimensionales. Esta ecuación se puede escribir en función de las variables acción-ángulo de la siguiente manera²⁰

$$N_{cl}(E) = \int dI_1dI_2\Theta[H(I_1, I_2) - E]. \quad (2.35)$$

Una primera comparación de $N_{cl}(E)$ y $N_q(E)$ muestra que la primera es una función suave mientras que la segunda es no derivable. Si se toman como válidas las reglas de cuantización SWI, la ecuación (2.33) puede escribirse

$$N_q(E) = \sum_{n_1, n_2} \Theta[E - H(2\pi\hbar n_1, 2\pi\hbar n_2)], \quad (2.36)$$

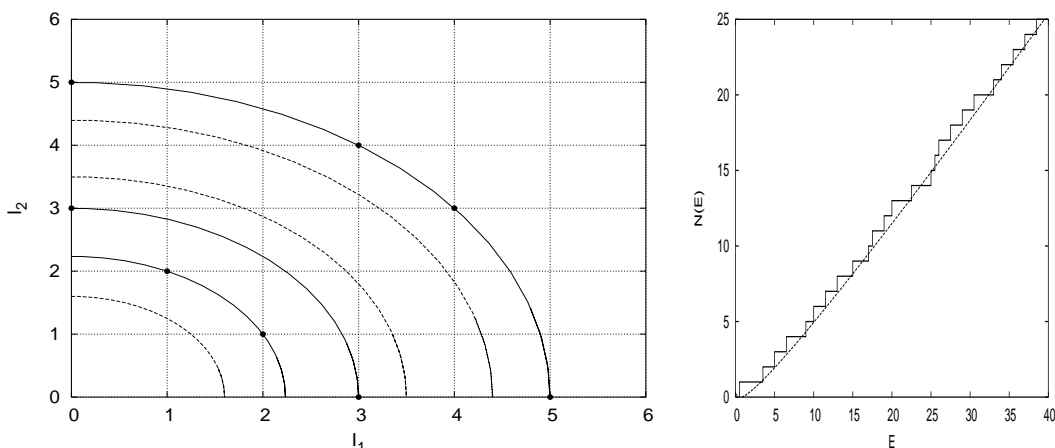
donde se han considerado solamente dos grados de libertad por simplicidad. En consecuencia, si la ecuación (2.34) se normaliza adecuadamente

$$N_{cl}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dI_1dI_2\Theta[H(I_1, I_2) - E], \quad (2.37)$$

es evidente que $N_{cl}(E)$ y $N_q(E)$ crecen de la misma manera en término medio, a pesar de la no analiticidad de la segunda; concretamente, la segunda es una escalera cuya pendiente media viene determinada por la primera.

En la figura 2.4 se representa gráficamente la cuantización SIW de un hamiltoniano $H = I_1^2 + I_2^2$; se ha considerado que $2\pi\hbar = 1$, de forma que $I_j = m$, donde m es un número natural positivo. En el panel de la izquierda se representa la función $E = I_1^2 + I_2^2$ para distintos valores de la energía: las líneas continuas representan energías $E = 5$, $E = 9$ y $E = 25$, que son valores permitidos por las reglas de cuantización; las líneas discontinuas representan unos pocos valores de la energía no permitidos, correspondientes a valores no enteros de las acciones I_1 e I_2 ; y los puntos indican los valores de I_1 e I_2 que corresponden a cada energía permitida. En el panel de la derecha se representan las funciones $N_{cl}(E)$ (línea discontinua) y $N_q(E)$ (línea continua) para energías pequeñas (es decir, para niveles próximos al fundamental), calculadas según las ecuaciones (2.37) y (2.36) respectivamente. Como se observa en

²⁰De aquí en adelante se considerará por simplicidad un sistema con sólo dos grados de libertad. Asimismo, se suprimirán las negritas al hablar de sistemas genéricos $H(p, q)$.



(a) Diagrama de energías permitidas (líneas continuas) y prohibidas (líneas discontinuas) para $H = I_1^2 + I_2^2$. Los puntos indican los valores de I_1 e I_2 correspondientes a las energías permitidas.

(b) Conteos clásico (línea discontinua) y cuántico (línea continua) de la densidad acumulada $N(E)$ para $H = I_1^2 + I_2^2$.

Figura 2.4: Cuantización de un hamiltoniano $H = I_1^2 + I_2^2$ según reglas SIW.

la figura, los únicos valores permitidos para la energía son aquellos que pasan por un nodo de la red de tamaño $2\pi\hbar$; el resto de los valores son accesibles al sistema clásico pero no están permitidos en mecánica cuántica. Así pues, a pesar de que el número de estados hasta una energía E crece en media igual para el sistema clásico y para el sistema cuántico, éste último presenta fluctuaciones con respecto a dicho valor medio; el panel de la derecha de la figura 2.4 ilustra a la perfección este fenómeno. La conclusión fundamental que se obtiene de este resultado es que es posible separar la densidad de estados de un sistema cuántico en dos partes: una suave y otra fluctuante²¹

$$N(E) = \overline{N}(E) + \tilde{N}(E); \quad (2.38)$$

la parte suave procede del sistema clásico y la parte fluctuante es propia de la mecánica cuántica. Las propiedades estadísticas de la parte fluctuante van a servir para definir el caos en mecánica cuántica²².

²¹De ahora en adelante se suprime el subíndice q para referirse a la magnitud cuántica. Así pues $N(E) = N_q(E)$.

²²Desde un punto de vista riguroso, la ecuación (2.37) no es suficiente para describir la parte suave de $N_q(E)$ para energías próximas al fundamental. Para $H = I_1^2 + I_2^2$, la ecuación (2.37) se resuelve con facilidad y da como resultado $N_{cl} = \pi E/4$. Un cálculo exacto para este sistema [26] muestra que la parte suave de la densidad acumulada de estados vale, en realidad, $\overline{N}(E) = \pi E/4 - \sqrt{E} - 1/4$, de modo que las fluctuaciones cuánticas no se definen exactamente como la diferencia entre $N_{cl}(E)$

El argumento que se acaba de presentar es muy útil desde el punto de vista conceptual, pero la separación entre parte suave y parte fluctuante puede definirse también de una manera mucho más formal [27]. Considérese un sistema integrable con dos grados de libertad, cuya densidad de estados es

$$g(E) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \delta[E - E(n_1, n_2)]. \quad (2.39)$$

Para escribir esta suma como un desarrollo de funciones suaves utilizamos la fórmula de suma de Poisson

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) = \sum_{M=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dn f(n) \exp(2\pi i M n) + \frac{1}{2} f(0), \quad (2.40)$$

para lo cual se asume que $f(n)$ y sus derivadas son nulas en $n \rightarrow \infty$. Al aplicar esta regla de suma a la densidad de estados (2.39) se obtiene un desarrollo que incluye términos monótonos (los correspondientes a $M = 0$) y términos oscilantes. Se puede comprobar [27] que el término dominante con $M = 0$ da lugar a

$$\bar{g}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dpdq \delta[E - H(p, q)], \quad (2.41)$$

que coincide con la parte suave tal y como se ha definido en la ecuación (2.37).

En conclusión, hemos visto que en los sistemas integrables es posible calcular el espectro de energía mediante sucesivas aproximaciones a partir de la dinámica clásica. Además, la densidad de estados puede dividirse en una parte suave y una fluctuante, de forma que la segunda caracteriza exclusivamente al sistema cuántico.

2.3.2. Cuantización de sistemas caóticos

Los resultados de la sección anterior son muy prometedores en la búsqueda de las manifestaciones del caos en mecánica cuántica, ya que relacionan directamente la mecánica clásica y la mecánica cuántica de los sistemas integrables. Sin embargo, el análisis de los sistemas caóticos no resulta tan sencillo: ya en 1917 Einstein [28] se percató de que la cuantización SWI no puede aplicarse a los sistemas no integrables, y lo mismo sucede con la aproximación WKB (ambos formalismos requieren que el hamiltoniano pueda escribirse en función de N acciones). La forma de establecer un vínculo directo entre la ecuación de Schrödinger y la dinámica clásica no llegó hasta

y $N_q(E)$, sino que a la primera se le añaden términos correctores de origen cuántico que son importantes a baja energía; a alta energía, sin embargo, la expresión $N_{cl}(E)$ es aproximadamente correcta. La línea discontinua del panel de la derecha de la figura 2.4 se corresponde en realidad con $\bar{N}(E)$.

los años setenta del pasado siglo, gracias a los trabajos de Martin C. Gutzwiller [3, 29]; en ellos se parte de la integral de camino de Feynmann [30] para calcular la densidad de estados de un sistema completamente caótico (cuyas órbitas periódicas son inestables y aisladas) en función de magnitudes clásicas; posteriormente el mismo formalismo se aplicó a sistemas integrables [31]. En esta sección se introduce esta teoría de forma conceptual, obviando los detalles técnicos y utilizando un sencillo modelo unidimensional; el lector interesado en los detalles puede remitirse a los trabajos originales de Gutzwiller y Berry [29, 31].

Considérese un sistema cuántico descrito mediante la ecuación de Schrödinger; por simplicidad vamos a suponer que $H = p^2/2m + V(q)$. La evolución temporal de dicho sistema viene determinada por el operador evolución $U(t)$, definido como

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right). \quad (2.42)$$

A partir de él, se define el propagador a un tiempo t como la probabilidad de que un estado inicial $|q_A\rangle$ evolucione hasta un estado final $|q_B\rangle$ en dicho tiempo t

$$K(q_A, q_B; t) = \langle q_B | U(t) | q_A \rangle. \quad (2.43)$$

La transformada de Fourier de dicho operador es la función de Green

$$G(q_A, q_B; E) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt K(q_A, q_B; t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}Et\right) = \left\langle q_B \left| \frac{1}{E - H} \right| q_A \right\rangle. \quad (2.44)$$

Para tiempos τ pequeños, el operador evolución temporal se puede escribir

$$\langle q_A | U(\tau) | q_B \rangle = \left(\frac{1}{2\pi i \hbar}\right)^{d/2} |D_{BA}|^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}W_{BA}\right), \quad (2.45)$$

donde d es la dimensión del sistema, W_{BA} es

$$W_{BA}(\tau) = \int_0^\tau dt L(q, \dot{q}), \quad (2.46)$$

donde $L(q, \dot{q}) = qp - H(q, p)$ es el lagrangiano del sistema, y D_{BA} es igual a

$$|D_{BA}| = \left| -\frac{\partial^2 W_{BA}(\tau)}{\partial q_{A_i} \partial q_{B_i}} \right|. \quad (2.47)$$

A partir de los resultados anteriores, y tomando $t = \tau N$, se puede escribir

$$K(q_A, q_B; t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2\pi i \hbar}\right)^{Nd/2} \int dq_1 \cdots dq_{N-1} \left| \prod_{i=0}^{N-1} D_{i,i+1} \right|^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} W_{i,i+1}\right), \quad (2.48)$$

donde $q_0 = q_A$ y $q_N = q_B$, extremos de la trayectoria. El límite anterior puede expresarse de forma simbólica como

$$K(q_A, q_B; t) = \int \mathcal{D}(q) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt L(q, \dot{q}) \right], \quad (2.49)$$

donde el elemento $\mathcal{D}(q)$ representa el límite al continuo del producto $dq_1 \dots dq_N$.

La expresión (2.49) es matemáticamente muy complicada y adolece de algunos problemas técnicos de definición; sin embargo, su interpretación física es muy sencilla y útil a la hora de vincular la mecánica cuántica con la mecánica clásica. El propagador, que es una magnitud cuántica, está escrito en función de magnitudes clásicas, de forma que la mecánica cuántica sólo se manifiesta en el factor \hbar presente en el miembro de la derecha; así pues, esta relación vincula de manera natural la mecánica clásica con la mecánica cuántica²³. La interpretación física es la siguiente: el propagador cuántico se obtiene considerando todas las trayectorias posibles que unen q_A con q_B , pesadas con un factor que depende de su acción clásica; las trayectorias clásicamente permitidas, que son las que minimizan la acción, tienen una contribución especialmente relevante; en el resto, el integrando oscila muy deprisa, de forma que la integral se aproxima a cero. En el límite semiclásico $\hbar \rightarrow 0$, la integral se puede evaluar por el método de la fase estacionaria, de manera que solamente las trayectorias que cumplen esa condición (que son precisamente las trayectorias clásicas) tienen una contribución no nula

$$K(q_A, q_B; t) = \left(\frac{1}{2\pi i \hbar} \right)^{d/2} \sum_r |D_{BA,r}|^{1/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} W_{BA,r}(t) - i \frac{\nu_r \pi}{2} \right), \quad (2.50)$$

donde la suma incluye todas las órbitas clásicamente permitidas y ν_r es el número de puntos conjugados²⁴ de la r -ésima trayectoria²⁵.

A partir de esta relación, la mecánica semiclásica adquiere un papel fundamental en la búsqueda del caos en el mundo cuántico: gracias a ella es posible escribir observables cuánticos exclusivamente en función de magnitudes clásicas. En la actualidad, la mayoría de las líneas de investigación abiertas en caos cuántico están basadas íntegramente en la mecánica semiclásica, y muchos autores confían casi a ciegas en esta teoría a la hora de realizar cálculos. No obstante, antes de continuar

²³Nótese que en ningún momento se ha hecho ninguna hipótesis a cerca de si la dinámica es integrable o caótica.

²⁴Considérese un conjunto de trayectorias que parten del mismo punto inicial $q(\tau_0)$ con diferentes direcciones y momentos. Se dice que τ es un punto conjugado de τ_0 si alguna de las trayectorias que partieron de $q(\tau_0)$ se cortan en él. El lector interesado en una definición más precisa de este concepto puede consultar [3].

²⁵Este término aparece porque la aproximación de la fase estacionaria no se puede realizar directamente en estos puntos debido a una divergencia. Para más detalles véase, por ejemplo, [32].

adelante hay que advertir que la mecánica semiclásica es sólo una aproximación a la verdadera mecánica cuántica, que funciona muy bien para algunos sistemas y en general a alta energía de excitación (donde se puede suponer que $\hbar \rightarrow 0$ sin cometer un gran error), pero que no es aplicable a todo tipo de cálculos. En particular, hay muchos estudios que muestran que la mecánica semiclásica es muy útil a la hora de describir propiedades estadísticas de sistemas cuánticos, pero que no se puede aplicar al cálculo de observables concretos; por ejemplo, en [33] se muestra como esta teoría no sirve para determinar con exactitud el espectro de energías de un sistema cuántico.

Densidad de estados

En la sección anterior se vio que la densidad de energía es una magnitud muy útil a la hora de buscar las manifestaciones cuánticas del caos; allí se comprobó que en sistemas integrables es posible discernir entre una parte suave y una parte fluctuante, de modo que esta última caracteriza la mecánica cuántica. A continuación procedemos al cálculo de la misma magnitud para sistemas caóticos en aproximación semiclásica a partir de la ecuación (2.50); puede considerarse que este cálculo es equivalente al primer orden de la cuantización WKB.

Para llevar adelante este propósito hay que aplicar la relación entre el propagador y la función de Green (2.44), y tener en cuenta que la densidad de estados puede calcularse a partir de ésta última según

$$g(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\int dq G(q, q, E) \right]. \quad (2.51)$$

La aplicación de (2.44) en la expresión para el propagador (2.50) permite escribir la función de Green en términos de la integral de una exponencial proporcional a \hbar^{-1} . Al igual que en el caso anterior, la integración puede realizarse mediante el método de la fase estacionaria, considerando el límite $\hbar \rightarrow 0$. Si se escriben todos los factores en función de la acción clásica del sistema, la función de Green resulta

$$G(q_A, q_B, E) = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2\pi i \hbar} \right)^{(d-1)/2} \sum_r |\Delta_{BA,r}|^{1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_r(q_A, q_B, E) - i \frac{\nu_r \pi}{2} \right], \quad (2.52)$$

donde $\Delta_{BA,r}$ es un determinante función de la acción²⁶.

Una vez obtenida esta expresión, la densidad de estados se calcula mediante la aplicación directa de (2.51). Dicho cálculo se realiza considerando sólo las órbitas que comienzan y terminan en el mismo punto $q_A = q_B = q$, y aplicando nuevamente la aproximación de la fase estacionaria para realizar la integral; así pues, esta

²⁶La expresión exacta de este determinante es abstrusa y no aporta información conceptual relevante. El lector interesado puede consultar [32].

aproximación implica que sólo las órbitas periódicas (aquellas en las que además de $q_A = q_B = q$ se cumple que $p_A = p_B$) tienen una contribución relevante. La expresión final de la densidad de estados puede escribirse de manera compacta como sigue

$$g(E) = 2 \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} A_{p,r}(E) \cos \left[\frac{rS_p(E)}{\hbar} + \nu_{p,r} \right]. \quad (2.53)$$

A pesar de su aspecto sencillo, el cálculo de la suma (2.53) para un sistema concreto es muy difícil, y en muchas ocasiones hay problemas de convergencia. El significado de los distintos términos que aparecen en la ecuación es el siguiente: el subíndice p indica órbitas periódicas primitivas (aquellas que no se pueden calcular como repeticiones de órbitas más simples); el subíndice r indica las repeticiones de las órbitas anteriores²⁷; $A_{p,r}$ está relacionado con la estabilidad de la órbita y puede expresarse en función de los exponentes de Lyapunov; y la fase $\nu_{p,r}$ se conoce como índice de Maslov y está relacionada con ciertas propiedades topológicas de las órbitas.

La ecuación (2.53) está definida considerando todas las órbitas periódicas, incluidas las de periodo nulo (aquellas en las que la partícula está parada). No obstante, un cálculo sencillo muestra que éstas últimas órbitas contribuyen de forma particular a la densidad de estados, dando lugar a un término de orden cero

$$g_0(E) = \frac{1}{2\pi\hbar d} \int dpdq \delta[E - H(p, q)], \quad (2.54)$$

que es formalmente idéntico a (2.41), definido como la parte suave de la densidad de estados para sistemas integrables. Nótese además que en la derivación de (2.53) no se ha hecho ninguna hipótesis sobre la integrabilidad del análogo clásico, así que podemos concluir que en cualquier sistema cuántico se puede establecer una división

$$g(E) = \bar{g}(E) + \tilde{g}(E), \quad (2.55)$$

donde $\bar{g}(E)$ viene determinado por (2.54) y $\tilde{g}(E)$ por (2.53) para órbitas de periodo no nulo, con independencia de que el análogo clásico sea integrable o caótico²⁸.

2.3.3. Universalidad de las fluctuaciones

La ecuación (2.53) expresa la densidad de estados de un sistema cuántico en función únicamente de magnitudes clásicas, de forma que cada órbita periódica contribuye con una función sinusoidal. Este resultado es muy interesante desde el punto

²⁷La separación de la suma en órbitas periódicas primitivas y repeticiones resulta especialmente útil a la hora de calcular.

²⁸En la ecuación (2.53) la diferencia entre el caos y la integrabilidad queda determinada por $A_{p,r}(E)$, cuya expresión es diferente para los sistemas integrables y para los sistemas caóticos.

de vista conceptual, pero es de muy difícil aplicación en la práctica: no existe un método para encontrar las órbitas periódicas de un hamiltoniano cualquiera. Invertiendo el problema, es posible calcular el espectro de energías de un sistema cuántico para obtener a partir de él información a cerca de las órbitas periódicas del análogo clásico[32]; pero tampoco es fácil hacer un estudio sistemático debido al ingente número de órbitas que intervienen en una ventana de energía. Por otro lado, la ecuación (2.53) es diferente para cada sistema, ya que involucra información específica y muy diferente de un sistema a otro; sin embargo, los resultados más importantes en caos cuántico [22, 23] establecen que la parte fluctuante de la densidad es universal y diferente para sistemas caóticos e integrables. Es de gran interés, por lo tanto, preguntarse si existe alguna manera de calcular la densidad de estados sin hacer explícitamente la suma sobre todas las órbitas periódicas del sistema.

La pregunta anterior puede responderse considerando en primer lugar que el número de órbitas periódicas cuyo periodo se encuentra en una ventana $\Delta\tau$ crece muy deprisa con el periodo τ , de forma polinomial en sistemas integrables y exponencial en sistemas ergódicos [3]. La consecuencia principal de este resultado es que, a partir de un cierto periodo τ_{min} ²⁹, el número de órbitas periódicas es tan grande que basta conocer ciertas propiedades globales para evaluar la suma (2.53). La universalidad de las fluctuaciones cuánticas es debida a este fenómeno.

Considérese un hamiltoniano $H(p, q)$, bien integrable (cuyas órbitas periódicas son estables), bien totalmente ergódico (cuyas órbitas periódicas están aisladas y son inestables). Debido al crecimiento del número de órbitas con el periodo, las órbitas periódicas en cualquiera de estos sistemas, consideradas con su amplitud natural, son uniformemente densas en el espacio de fases[34]. Esta propiedad permite olvidarse de cada una de las órbitas individuales y utilizar en su lugar la siguiente propiedad universal del espacio de fases: en un sistema integrable, todas las órbitas se encuentran en un toro N-dimensional; en un sistema ergódico, las órbitas recorren todo el espacio de fases. Esta propiedad universal se manifiesta en la suma de las amplitudes asociadas a cada órbita, que cumple

$$\sum_{j; |S_j| < |S|} A_j^2 = \alpha |S|, \quad S \rightarrow \infty, \quad (2.56)$$

para un sistema integrable, y

$$\sum_{j; |S_j| < |S|} A_j^2 = \beta S^2, \quad S \rightarrow \infty, \quad (2.57)$$

²⁹El valor de τ_{min} no se puede definir de una forma precisa: sólo indica a partir de qué valor del periodo el número de órbitas periódicas es “suficiente” para poder caracterizar el sistema de forma global. En la práctica suele tomarse como aproximación el periodo de la órbita más corta, que es mucho más fácil de calcular.

para un sistema ergódico [34], donde A_j son las amplitudes $A(E)$ de la ecuación (2.53).

Las ecuaciones (2.56) y (2.57) se conocen como reglas de suma de Hannay y Ozorio de Almeida, y permiten calcular propiedades estadísticas del espectro de energías sin recurrir a la suma de todas las órbitas individuales. Su aplicación, no obstante, está restringida a sistemas integrables y a sistemas completamente ergódicos, ya que los sistemas intermedios (todos los que no son ni integrables ni totalmente caóticos; en particular, los descritos en el teorema KAM, por ejemplo) no presentan una estructura global característica del espacio de fases.

Considérese la función de correlación de la densidad de energía (2.53)

$$C_g(E, \epsilon) = 4 \left\langle \sum_{p,p'} A_p(E + \epsilon/2) A_{p'}(E - \epsilon/2) \cos \left(\frac{S_p(E + \epsilon/2)}{\hbar} \right) \cos \left(\frac{S_{p'}(E - \epsilon/2)}{\hbar} \right) \right\rangle, \quad (2.58)$$

donde, para simplificar la notación, se han incluido las repeticiones en los índices p y p' , y el índice de Maslov en la acción S . Si el valor medio se calcula sobre una ventana de energía pequeña, puede suponerse que las amplitudes A_p son constantes (es decir, no dependen de ϵ) y que la aproximación lineal de la acción

$$S_p(E \pm \epsilon/2) = S_p(E_0) + \tau_p(E_0)(E - E_0) \pm \tau_p(E_0) \frac{\epsilon}{2} \quad (2.59)$$

es suficiente para el cálculo que se va a realizar. Si, además, se desarrolla el producto de cosenos como suma de cosenos suma y diferencia, y se asume que todos los términos oscilantes en los cuales la fase varía muy rápidamente (dentro de la ventana en la que se promedia) no contribuyen al valor medio, la función de correlación se reduce a

$$C_g(E) = 2 \left\langle \sum_{p,p'} A_p A_{p'} \cos \left[\frac{S_p - S_{p'}}{\hbar} + \frac{\tau_p - \tau_{p'}}{\hbar} (E - E_0) + \frac{\tau_p + \tau_{p'}}{\hbar} \frac{\epsilon}{2} \right] \right\rangle. \quad (2.60)$$

El resultado puede simplificarse aún más si se considera que de todos los términos que constituyen esta suma, solamente aquellos que cumplen $\tau_p \approx \tau_{p'}$ tienen una contribución significativa.

La transformada de Fourier de la función de correlación se conoce como factor de forma

$$K(E, \tau) = h^2 \left\langle \sum_{p,p'} \cos \left(\frac{S_p - S_{p'}}{\hbar} \right) \delta \left[\tau - \frac{\tau_p + \tau_{p'}}{2} \right] \right\rangle \quad (2.61)$$

y contiene toda la información sobre correlaciones estadísticas a dos puntos del espectro. Si consideramos que sólo los términos con $\tau_p \approx \tau_{p'} \approx \tau$ tienen una contribución

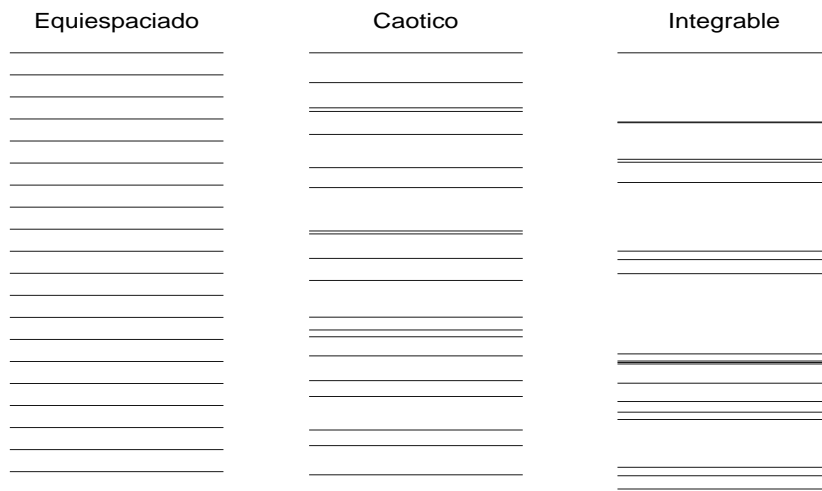


Figura 2.5: Espectro de energías para un oscilador armónico unidimensional (espectro equiespaciado), un sistema caótico y un sistema integrable. En todos ellos se ha reescalado el espectro de forma que $\bar{g}(E) = 1$.

significativa a la función de correlación, podemos simplificar la suma considerando sólo los términos para los cuales $p = p'$, de forma que

$$K_D(E, \tau) = \frac{2}{\beta} \sum_p A_p^2 \delta(\tau - \tau_p). \quad (2.62)$$

Este resultado se conoce como *aproximación diagonal* (de ahí el subíndice D) y permite aplicar las reglas de suma de Hannay y Ozorio para calcular las propiedades estadísticas de los sistemas caóticos y regulares sin conocer los detalles concretos de cada sistema. El subíndice β indica si el sistema posee o no simetría bajo inversión temporal y su valor es el correspondiente a la teoría de matrices aleatorias³⁰; aparece porque si existe simetría bajo inversión temporal hay que considerar la contribución de las órbitas invertidas p^T cuando $p^T = p'$.

La conclusión que se obtiene tras este cálculo es la siguiente: *las propiedades estadísticas de los sistemas cuánticos integrables y ergódicos son universales, al menos aquellas que involucran periodos mayores que τ_{min}* . De aquí en adelante denotaremos como *espectro caótico* a aquel cuyas propiedades estadísticas coinciden con las de los sistemas ergódicos, y como *espectro integrable o regular* a aquel cuyas propiedades estadísticas coinciden con las de los sistemas integrables.

En la figura 2.5 se representan 20 niveles de un oscilador armónico unidimensional, un sistema caótico y un sistema integrable; los tres espectros se han reescalado

³⁰Véase la sección siguiente.

para que $\bar{g}(E) = 1$. En la figura se aprecia con nitidez que el aspecto de los tres espectros es muy diferente; en particular, el espectro caótico se parece mucho más al equiespaciado que el integrable. Esta diferencia se expresa matemáticamente en las diferentes estadísticas espectrales que se presentan en la próxima sección. De momento podemos concluir que una simple inspección visual parece suficiente para discernir entre un espectro caótico y uno regular.

2.3.4. Teoría de matrices aleatorias

La universalidad de las propiedades estadísticas de las fluctuaciones del espectro de energías incita a buscar modelos genéricos que describan los sistemas caóticos y los sistemas integrables. Desde el trabajo de Bohigas, Giannoni y Schmit [23], la teoría de matrices aleatorias (RMT)³¹ es el modelo por antonomasia en la descripción del caos cuántico. A continuación repasamos su base conceptual y presentamos sus resultados más importantes; otros aspectos más técnicos se describen en el apéndice A.

Origen de la Teoría de Matrices Aleatorias

La RMT nació entre finales de los años cincuenta y principios de los sesenta, gracias a los trabajos de Wigner y Dyson [35], que fue quien la formalizó por primera vez. Su objetivo consiste en formular una teoría estadística para los niveles muy excitados de los núcleos pesados, donde el modelo de capas y sus refinamientos no son aplicables; se pretende sacrificar el conocimiento exacto de cada uno de los niveles por una descripción de sus propiedades estadísticas. La forma de llevar adelante este objetivo es renunciando al conocimiento exacto, no sólo del sistema concreto en estudio, sino también de su naturaleza: el núcleo complejo se modela como una caja negra en la que sus partículas interactúan de forma desconocida. Esta base conceptual conduce a escribir el hamiltoniano del núcleo como una matriz cuyos componentes están elegidos al azar, considerando como única restricción las simetrías generales³².

La motivación que se acaba de comentar pone en evidencia que la formulación de la RMT no se hizo con vistas a describir el caos cuántico; sin embargo, los trabajos sobre esta disciplina que se realizaron a principios de los años ochenta, en especial el de Bohigas, Giannoni y Schmit [23], vincularon muy sólidamente ambas teorías. Hoy en día aún se desconoce con exactitud por qué la RMT, formulada para describir un sistema tan complejo como el núcleo atómico, sirve para caracterizar sistemas sencillos como los billares cuánticos. La cuestión, no obstante, es que la vinculación

³¹Del inglés *Random Matrix Theory*.

³²En el capítulo 4 de la tesis se da una explicación detallada de por qué el desconocimiento de la interacción da lugar a una matriz hamiltoniana aleatoria.

establecida por la conjetura BGS funciona, de modo que el conocimiento de la RMT es fundamental para entender el caos cuántico. Por otro lado, la teoría de matrices aleatorias se ha mostrado muy eficaz en la descripción de otras ramas de la física completamente ajenas al caos cuántico y a la física nuclear [36].

Formulación matemática

La RMT estándar está compuesta por tres colectividades diferentes, atendiendo a la simetría del problema³³. En este trabajo incluimos, además, una cuarta, que describe los sistemas integrables, tal y como se hizo en [38].

1. Colectividad GOE (*Gaussian Orthogonal Ensemble*), compuesta por matrices aleatorias, hermíticas y simétricas. Sus elementos H_{jk} tales que $j \geq k$ son estadísticamente independientes, y su distribución de probabilidad $P(H)$ es invariante bajo todas las transformaciones reales y ortogonales de H . Es aplicable a sistemas con invariación bajo inversión temporal y simetría bajo rotaciones, y a sistemas invariantes bajo inversión temporal que no verifican la simetría bajo rotaciones pero tienen espín entero.
2. Colectividad GUE (*Gaussian Unitarian Ensemble*), compuesta por matrices aleatorias y hermíticas. Sus elementos diagonales H_{jj} y las partes reales e imaginaria de sus elementos no diagonales H_{jk} con $j > k$ son estadísticamente independientes, y su distribución de probabilidad es invariante bajo todas las transformaciones unitarias de H . Es aplicable a sistemas que no son invariantes bajo inversión temporal.
3. Colectividad GSE (*Gaussian Symplectic Ensemble*), compuesta por matrices hermíticas y auto-duales. Sus elementos diagonales H_{jj} y los cuatro componentes cuaterniónicos de los elementos no diagonales H_{jk} con $j > k$ son estadísticamente independientes, y su distribución de probabilidad es invariante bajo todas las transformaciones simplécticas de H . Es aplicable a sistemas con espín semientero e invariación bajo inversión temporal.
4. Colectividad GDE (*Gaussian Diagonal Ensemble*), compuesta por matrices diagonales y reales. Todos sus elementos son estadísticamente independientes. Es aplicable a sistemas integrables en general.

Las propiedades matemáticas de estas colectividades son muy parecidas en los cuatro casos. En general, para que se cumplan las invariaciones y las simetrías es

³³En realidad existen muchas más colectividades, pero son menos habituales y no se utilizan en este trabajo [37].

necesario que la distribución de probabilidad de los elementos de las matrices que las representan verifique

$$p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = C \exp [-BTr(H) - ATr(H^2)], \quad (2.63)$$

donde la constante B puede tomarse cero sin pérdida de generalidad, y la constante C queda fijada por normalización. De este modo, las expresiones de la distribución de probabilidad quedan:

$$p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{N/2} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{N(N-1)/2} \exp \left\{ -A \sum_{n,m} H_{nm}^2 \right\} \quad (2.64)$$

para el GOE;

$$p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{N/2} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{N(N-1)/2} \exp \left\{ -A \sum_{n,m} [(H_R)_{nm}^2 + (H_I)_{nm}^2] \right\} \quad (2.65)$$

donde H_R y H_I son la parte real y la parte imaginaria del hamiltoniano respectivamente, para el GUE; y

$$p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{N/2} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{N(N-1)/2} \exp \left\{ -A \sum_{n,m} [(H_0)_{nm}^2 + (H_1)_{nm}^2 + (H_2)_{nm}^2 + (H_3)_{nm}^2] \right\} \quad (2.66)$$

donde H_0 , H_1 , H_2 y H_3 son las componentes cuaterniónicas, para el GSE. Para el GDE se aplica (2.64) sólo para los elementos de la diagonal; el resto son nulos.

Salvo en el caso del GDE, cuyos autovalores son directamente los elementos generados, estas tres distribuciones de probabilidad dan lugar a un espectro de energías que se caracteriza por la presencia de correlaciones entre los distintos niveles (esto es, cada nivel de energía no puede generarse mediante una variable aleatoria independiente). La distribución de probabilidad de dicho espectro puede escribirse de una forma compacta para las tres colectividades:

$$P(E_1, \dots, E_N) \propto \prod_{n>m} |E_n - E_m|^\nu \exp \left(-A \sum_n E_n^2 \right), \quad (2.67)$$

donde el exponente ν vale 1 para GOE, 2 para GUE y 4 para GSE. Este exponente está relacionado directamente con la repulsión entre niveles característica del caos cuántico, como se verá más adelante³⁴.

La distribución de probabilidad para los autovalores da lugar a espectros de niveles cuya densidad puede describirse mediante una parte suave más una parte fluctuante. De la ecuación (2.67) se deduce inmediatamente que en la parte fluctuante ha de haber correlaciones no nulas; la parte suave viene determinada por

$$\bar{g}(E) = \begin{cases} \frac{2A}{\pi\nu} \sqrt{\frac{\nu N}{A} - E^2} & |E| \leq \sqrt{\frac{\nu N}{A}}; \\ 0 & |E| \geq \sqrt{\frac{\nu N}{A}}, \end{cases} \quad (2.68)$$

donde N es la dimensión del sistema [37]. Al igual que ocurre con la distribución de probabilidad para los autovalores, la colectividad GDE es diferente: su densidad de estados es una Gaussiana y su parte fluctuante no presenta correlaciones.

2.3.5. Estadísticos espectrales

La universalidad de las fluctuaciones para sistemas caóticos y regulares, y la RMT como modelo genérico del caos en mecánica cuántica erigen a la estadística espectral como una herramienta básica en la búsqueda de trazas del caos en mecánica cuántica. La estadística espectral estudia cómo una secuencia de niveles, esto es, una secuencia ordenada de números E_1, E_2, \dots, E_N , se ajusta a las predicciones de una teoría estadística (como la RMT). Según la definición de Mehta [37], un estadístico se define como un número W que puede calcularse a partir de una secuencia finita de números (en este caso, de una secuencia finita de niveles, que es la información de la que se dispone en un experimento o en un cálculo teórico) y para el cual su media $\langle W \rangle$ y su varianza $V_W = \langle (W - \langle W \rangle)^2 \rangle$ son conocidas a partir de un modelo teórico.

Desde un punto de vista práctico, pueden distinguirse dos tipos de estadísticos: los que implican tan sólo correlaciones a primeros vecinos (es decir, correlaciones entre un nivel y el inmediatamente anterior o siguiente) y los que involucran correlaciones a más largo alcance. En estos últimos, la universalidad sólo se manifiesta en ventanas $\Delta E < E_{max}$, donde E_{max} es la escala de energía asociada a la órbita periódica de periodo más corto $E_{max} = h/\tau_{min}$; para ventanas mayores, las propiedades estadísticas son distintas para cada sistema. Por el contrario, en los estadísticos de corto alcance la universalidad se manifiesta sin ningún tipo de restricción.

³⁴En la propia ecuación (2.67) se pone de manifiesto que el término $(E_n - E_m)^\nu$ implica que la probabilidad de que dos niveles tengan la misma energía es nula, lo cual puede entenderse directamente como una repulsión.

En esta sección se revisan los estadísticos habituales, así como su interpretación física.

Proceso de reescalado

Considérese el espectro de un sistema cuántico $\{E_i\}$, $i = 1, 2, \dots, N$. A la vista de los resultados de las secciones anteriores, es evidente que las magnitudes que se pueden calcular a partir de él (la densidad de estados, por ejemplo) presentan una parte suave y una parte fluctuante. El comportamiento universal, sin embargo, sólo puede aparecer en la parte fluctuante, que es la que caracteriza la mecánica cuántica³⁵. Antes de aplicar un estadístico espectral, es necesario, por lo tanto, separar la parte suave de la parte fluctuante; el algoritmo que se utiliza para tal efecto se denomina proceso de reescalado³⁶.

En general, el proceso de reescalado puede ser muy complicado si no se dispone de un modelo teórico que dé una expresión para $\bar{g}(E)$, lo que ocurre en la mayoría de los casos [40]. No obstante, aquí no vamos a entrar en este tipo de detalles: vamos a suponer que $\bar{g}(E)$ (o la densidad acumulada $\bar{N}(E)$, que es lo que se utiliza en la práctica) es conocida o puede determinarse con facilidad; el lector interesado en los detalles técnicos puede consultar las referencias [39, 40] y en el apéndice C.

El proceso de reescalado consiste en transformar cada nivel E_i en una magnitud adimensional ϵ_i mediante

$$\epsilon_i = \bar{N}(E_i). \quad (2.69)$$

El espectro resultante $\{\epsilon_i\}$ verifica $\langle s_i \rangle = 1$ ³⁷, donde $s_i = \epsilon_{i+1} - \epsilon_i$. Esto permite definir las fluctuaciones de $\{\epsilon_i\}$ por comparación con el espectro del oscilador armónico unidimensional, que es equiespaciado. Todos los estadísticos que detallamos a continuación se calculan a partir del espectro reescalado.

³⁵Esta afirmación puede entenderse de dos maneras. Por un lado, la ecuación (2.54) muestra que la parte suave de la densidad contiene básicamente información clásica, de modo que no puede servir para caracterizar la universalidad del caos en mecánica cuántica. Por otro, las reglas de suma de Ozorio [34] presentadas en la sección anterior sólo son aplicables para órbitas de periodo largo; la parte suave de la densidad de estados representa la contribución de las órbitas de periodo nulo.

³⁶Reescalado es una traducción libre del término inglés *unfolding*. Otra posible traducción es *desdoblamiento*, más literal y, quizá, más significativa, en tanto en cuanto al reescalar “desdoblamos” el espectro al eliminar la forma global que impone la parte suave de la densidad de estados. Se ha elegido “reescalado” por coherencia con trabajos anteriores [39].

³⁷Este valor medio puede entenderse como una media sobre sistemas con las mismas propiedades. Más adelante entraremos en detalles al respecto.

Correlaciones de corto alcance

Una de las características más representativas del espectro de energía de los sistemas caóticos³⁸ es la repulsión de niveles, que consiste fundamentalmente en que la probabilidad de que dos niveles consecutivos se hallen infinitamente próximos es nula. Una forma física de apreciar este fenómeno es la siguiente. Considérese un sistema que dependa de un parámetro externo X controlable experimentalmente (el campo magnético, por ejemplo) de forma que dicho parámetro pueda variarse en un régimen en el que el sistema es siempre caótico. Obténgase el espectro de energías variando de forma suave el parámetro X y obsérvese la trayectoria de cada nivel de energía en función de X . El resultado más característico de este experimento es que la distancia entre dos niveles consecutivos puede variar bruscamente en función de X , pero siempre de forma que los niveles no se cruzan ni se tocan; por eso se dice que los espectros caóticos presentan repulsión de niveles. Por el contrario, si el mismo experimento se repite en un sistema que permanece integrable al variar X , los niveles de energía pueden cruzarse sin ningún tipo de restricción.

El estadístico más utilizado para caracterizar las correlaciones de corto alcance es la distribución de probabilidad $P(s)$ de los espaciamientos de primeros vecinos $s_i = \epsilon_{i+1} - \epsilon_i$. Debido a la repulsión de niveles, en los sistemas caóticos $P(s) \rightarrow 0$ cuando $s \rightarrow 0$; en los sistemas integrables, por el contrario, no existe esta restricción. Los trabajos seminales de Berry y Tabor [22], y Bohigas, Giannoni y Schmit [23] proponen expresiones exactas para la $P(s)$ de sistemas integrables y caóticos, respectivamente; dichas expresiones han sido corroboradas posteriormente por multitud de trabajos teóricos y experimentales.

En el caso de los sistemas integrables, Berry y Tabor [22] demostraron con cierto rigor en el límite semiclásico que la secuencia $\{s_i\}$ de espaciamientos para un sistema integrable puede considerarse como una secuencia de variables aleatorias independientes. Esto da lugar a que la secuencia de espaciamientos para este tipo de sistemas siga una distribución de Poisson

$$P(s) = e^{-s}. \quad (2.70)$$

Nótese que según esta distribución, $P(0) = 1$, y que $\langle s \rangle = 1$, tal y como ha de ocurrir en una secuencia de niveles reescalados.

El caso de los sistemas caóticos es un poco más complicado. En [23], Bohigas y sus colaboradores conjeturaron que las propiedades estadísticas de los niveles de energía de los sistemas caóticos coinciden con las propiedades estadísticas de los autovalores de una colectividad de matrices aleatorias con simetría adecuada; dicha conjetura se conoce como conjetura BGS (Bohigas, Giannoni y Schmit) y aún no ha sido

³⁸De aquí en adelante utilizaremos el término *caótico* con el significado de ergódico o completamente caótico, salvo que se especifique lo contrario.

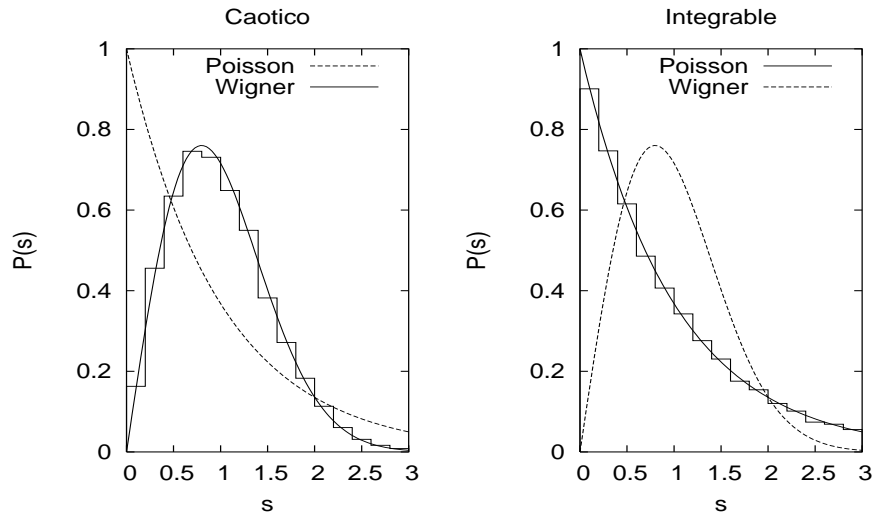


Figura 2.6: Distribución de espaciamientos de próximos vecinos para un billar rectangular a alta energía (ejemplo de sistema integrable) y un hamiltoniano GOE (ejemplo de sistema caótico). En ambas figuras, los histogramas representan los valores numéricos. En el caso integrable, la curva continua corresponde a Poisson y la discontinua a GOE; en el caso caótico se invierte esta tipografía.

demostrada con rigor, aunque hay abundante evidencia teórica y experimental de su veracidad (véase, por ejemplo, [36]). El cálculo de la distribución de espaciamientos correspondiente es complicado, pero puede aproximarse muy bien con la distribución de Wigner, válida para matrices con dimensión $N = 2$. En el caso de sistemas correspondientes a la colectividad GOE, dicha distribución es

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right). \quad (2.71)$$

Al igual que en el caso integrable $\langle s \rangle = 1$; la principal diferencia está en que $P(0) = 0$ debido a la repulsión de niveles.

Además de las dos distribuciones presentadas existen otras correspondientes a hamiltonianos caóticos con simetrías espacio-temporales distintas, correspondientes a las colectividades GUE y GSE de matrices aleatorias (para más detalle véase el apéndice A); también hay algunas expresiones para sistemas que no son ni integrables ni totalmente caóticos, en cuyo espacio de fases conviven regiones ergódicas y toros invariantes. La expresión exacta de todas estas distribuciones puede ser simple o complicada, pero todos los casos tienen un punto en común: $P(s) \rightarrow s^\beta$ cuando $s \rightarrow 0$, de manera que $P(0) = 0$ si $\beta > 0$; el exponente β mide la intensidad de la repulsión, de modo que $\beta = 0$ representa el caso integrable.

En la figura 2.6 se representa la distribución de espaciamientos a próximos vecinos para un sistema caótico (un hamiltoniano GOE) y para un sistema integrable (un

billar rectangular). En ella se aprecia como ambas distribuciones se distinguen con claridad. Además, el acuerdo entre los datos y las curvas teóricas es muy bueno.

Correlaciones de largo alcance

Además de la repulsión de niveles, los espectros caóticos se distinguen de los integrables por las correlaciones de largo alcance. En un espectro caótico, los niveles tienden a distribuirse de forma que no haya grandes desviaciones con respecto a un espectro equiespaciado; dicha propiedad se conoce con el nombre de *rigidez espectral*³⁹. Los sistemas integrables, por el contrario, se caracterizan porque no hay correlaciones en la secuencia de espaciamentos [22].

Una forma habitual de medir las correlaciones a largo alcance es la que se describe a continuación. Sea un espectro cualquiera $\{\epsilon_i\}$. Considérese el número de niveles que hay en una ventana de longitud L centrada en una energía ϵ

$$n(\epsilon, L) = \int_{\epsilon-L/2}^{\epsilon+L/2} dx \rho(x); \quad (2.72)$$

el proceso de reescalado garantiza que

$$\langle n(\epsilon, L) \rangle = L, \quad (2.73)$$

donde el valor medio se hace sobre una colectividad de sistemas equivalentes (véase la acotación que se hizo al definir el proceso de reescalado). Una manera estándar de medir las correlaciones a largo alcance es mediante la varianza de $n(E, L)$, definida según

$$\Sigma^2(L) = \langle (n(\epsilon, L) - L)^2 \rangle. \quad (2.74)$$

En un sistema integrable, el estadístico $\Sigma^2(L)$ es trivial debido a que la secuencia de espaciamentos es equivalente a una secuencia de variables aleatorias independientes

$$\Sigma^2(L) = L. \quad (2.75)$$

En los sistemas caóticos, por el contrario, la conjetura BGS afirma que las correlaciones a largo alcance coinciden con las predichas por la teoría de matrices aleatorias

$$\Sigma^2(L) = \frac{2}{\beta\pi^2} \log(L) + a_\beta + \mathcal{O}(L^{-1}) \quad L \gg 1 \quad (2.76)$$

donde β mide la intensidad de la repulsión de niveles y a_β depende de la simetría general del hamiltoniano [32, 37].

³⁹En muchas ocasiones, el término *rigidez espectral* se aplica directamente al estadístico $\Delta_3(L)$, que mide las correlaciones a largo alcance. En este trabajo entendemos que la rigidez espectral no es un estadístico sino una propiedad genérica de los sistemas caóticos, que se manifiesta en las correlaciones a largo alcance.

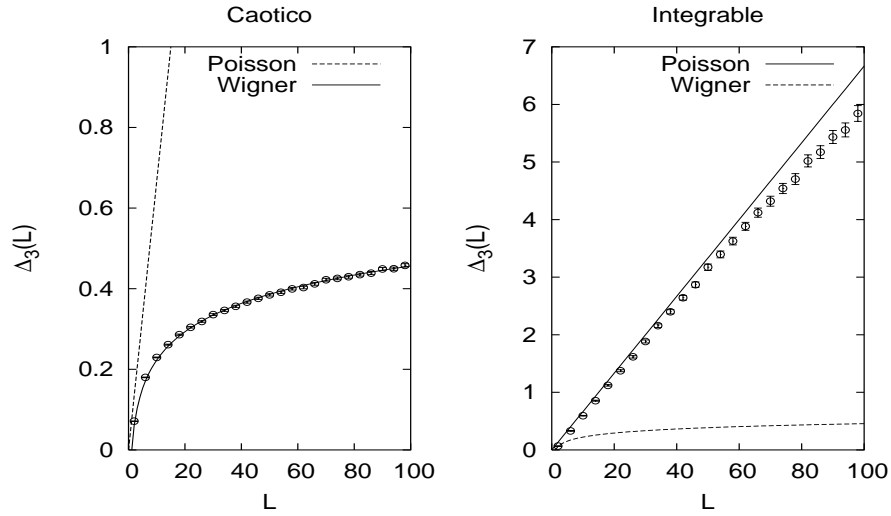


Figura 2.7: Estadístico $\Delta_3(L)$ para un billar rectangular a alta energía (ejemplo de sistema integrable) y para un hamiltoniano GOE (ejemplo de sistema caótico). En ambas figuras, los puntos corresponden a los valores numéricos. En el caso integrable, la curva continua corresponde a Poisson y la discontinua a GOE; en el caso caótico se invierte esta tipografía.

El estadístico $\Sigma^2(L)$ es conceptualmente sencillo: no es más que la varianza del número de niveles que hay en una ventana de energía de longitud L . Sin embargo, en la literatura es más habitual encontrar que las correlaciones de largo alcance se miden mediante el estadístico $\Delta_3(L)$, cuya definición es mucho más abstrusa

$$\Delta_3(L) = \left\langle \min_{a,b} \int_{\epsilon-L/2}^{\epsilon+L/2} dx [N(x) - a - bx]^2 \right\rangle. \quad (2.77)$$

En los sistemas integrables, la independencia de los espaciamientos implica que

$$\Delta_3(L) = \frac{L}{15}. \quad (2.78)$$

En los sistemas caóticos, el estadístico $\Delta_3(L)$ se determina mediante la teoría de matrices aleatorias

$$\Delta_3(L) = \frac{1}{\beta\pi^2} \log(L) + b_\beta + \mathcal{O}(L^{-1}) \quad L \gg 1, \quad (2.79)$$

donde b_β depende de la simetría del hamiltoniano.

En la figura 2.7 se representa el estadístico $\Delta_3(L)$ para los mismos sistemas que en la figura 2.6; las escalas de ambas figuras son diferentes para que puedan

apreciarse mejor las curvas. Al igual que ocurría con la $P(s)$, es posible distinguir con gran nitidez el caso regular del caso caótico. No obstante, también se aprecia una pequeña desviación entre la curva teórica y los datos en el caso integrable, especialmente para valores grandes de L . Esta desviación es debida al proceso de reescalado; comentaremos este punto en el apéndice C.

Otro estadístico habitual en la medición de las correlaciones de largo alcance es el factor de forma, definido en (2.61) como la transformada de Fourier de la función de correlación de la densidad de estados. En el apéndice A se ajuntan las expresiones de este estadístico para las distintas colectividades de RMT.

Todos estos resultados describen bastante bien la parte universal de las fluctuaciones de sistemas caóticos e integrables. Sin embargo, las reglas de suma de Ozorio [34] postulan la universalidad sólo a escalas de energía pequeñas, que son las que se corresponden con órbitas periódicas de largo período; a grandes escalas de energía (o, lo que es lo mismo, para valores grandes de la ventana L) no es de esperar un comportamiento universal. En consecuencia, los estadísticos que se acaban de presentar sólo son aplicables para valores de L suficientemente pequeños (que dependen del sistema y de lo lejos que esté centrada la ventana del estado fundamental)⁴⁰ [41].

2.3.6. Sistemas intermedios

Toda la teoría desarrollada en las secciones anteriores es aplicable tanto a sistemas integrables como a sistemas ergódicos. La gran mayoría de los sistemas hamiltonianos, sin embargo, no pertenece a ninguna de estas dos clases: en su espacio de fases clásico hay regiones integrables y regiones caóticas, sin que pueda distinguirse una característica global que los defina (en este sentido, el teorema KAM no es suficiente). Por esa razón, el estudio de la mecánica cuántica de este tipo de hamiltonianos no está tan bien sistematizado como en los casos ergódico e integrable; en particular, no se conoce ningún estadístico universal que los caracterice. En esta sección repasamos brevemente la teoría que existe hoy en día para este tipo de sistemas.

Estadísticos en sistemas con espacio de fases mixto

Una primera aproximación para estudiar sistemas en cuyo espacio de fases coexisten regiones ergódicas y toros invariantes consiste en suponer que cada una de estas regiones da lugar a una secuencia de espaciamientos, de forma que el espectro de energías del sistema es el resultado de la superposición de tantas secuencias como regiones independientes tenga el espacio de fases. Esta aproximación está justifica-

⁴⁰En el caso del factor de forma $K(\tau)$, la universalidad se pierde a valores pequeños de τ , que se corresponden con valores grandes de L .

da por el *principio de condensación semiclásica uniforme*⁴¹ [42], que implica que no hay interacción entre secuencias de niveles correspondientes a distintas regiones independientes del espacio de fases, lo cual hace posible tratarlas como secuencias estadísticamente independientes. De esta manera, cada región del espacio de fases queda caracterizado por un parámetro μ_i proporcional a su medida de Liouville⁴²; además, todas las regiones que contienen toros invariantes pueden pesarse con un único parámetro μ_1 .

El cálculo de los estadísticos para correlaciones de corto y largo alcance es relativamente sencillo en el marco de esta aproximación. La expresión que se obtiene para la distribución de espaciamentos de próximos vecinos es

$$P(s) = \frac{d^2}{ds^2} \left[\exp(-\mu_1 s) \prod_{i=2}^k \operatorname{erfc} \left(\frac{\pi^2}{2} \mu_i s \right) \right], \quad (2.80)$$

donde se ha supuesto que hay k regiones caóticas. Las correlaciones a largo alcance dan lugar a estadísticos más sencillos, ya que en ellas pueden separarse de forma aditiva las partes caóticas de las integrables:

$$\Sigma^2(L) = \Sigma_{Poisson}^2(\mu_1 L) + \sum_{i=2}^k \Sigma_{RMT}^2(\mu_i L); \quad (2.81)$$

$$\Delta_3(L) = \Delta_3^{Poisson}(\mu_1 L) + \sum_{i=2}^k \Delta_3^{RMT}(\mu_i L). \quad (2.82)$$

Estas expresiones se han comprobado mediante numerosos datos procedentes de experimentos o de simulación numérica y los resultados no son tan buenos como en los casos integrable y ergódico: para algunos sistemas funcionan bien; en otros, el desacuerdo es casi completo. Recientemente se ha puesto de manifiesto que el origen de tales discrepancias puede estar en que la independencia de las secuencias de espaciamentos nunca es total, ya que las aproximaciones anteriores sólo se verifican estrictamente en el límite semiclásico.

Una forma de interacción puramente cuántica entre las partes integrables y caóticas del espacio de fases es el *efecto tunnel caótico*⁴³ [43]. Este fenómeno permite que el sistema cuántico pase de una región a otra del espacio de fases, a pesar de que dicha transición está clásicamente prohibida. Cuando esto sucede, el hamiltoniano no puede escribirse como una superposición de un hamiltoniano integrable y un hamiltoniano caótico (lo que da lugar a dos subspectros independientes), sino

⁴¹Traducción literal de *principle of uniform semiclassical condensation* (PUSC).

⁴²La medida de Liouville se corresponde grosso modo con su fracción en el espacio de fases.

⁴³Traducción libre del inglés *chaos-assisted tunneling*.

que ha de contener un término mezcla

$$H = \sum_R E_R |\Psi_R\rangle\langle\Psi_R| + \sum_C E_C |\Psi_C\rangle\langle\Psi_C| + \sum_{RC} [V_{RC} |\Psi_R\rangle\langle\Psi_C| + c.c.], \quad (2.83)$$

donde E_R y Ψ_R son las energías y funciones de onda de los estados regulares, E_C y Ψ_C los de los estados caóticos, y V_{RC} describe la interacción entre estados caóticos y regulares, que fluctúa fuertemente y puede describirse con una distribución Gaussiana [44].

La inclusión del término de interacción en el hamiltoniano dificulta el cálculo de los estadísticos habituales, pero aún así es posible obtener una expresión para la $P(s)$, que depende de dos parámetros: la medida relativa de espacio de fases integrable y caótico, y la intensidad del efecto túnel entre las distintas regiones. En [44], se conjetura que la distribución resultante es universal y aplicable a cualquier sistema con espacio de fases mixto.

Bifurcaciones de órbitas periódicas

Las fórmulas semiclásicas para calcular la densidad de estados se pueden aplicar a órbitas periódicas aisladas e inestables (características de sistemas ergódicos) y a órbitas periódicas estables en familias (características de sistemas integrables). Los sistemas mixtos, que transitan desde la integrabilidad al caos, se caracterizan porque sus órbitas periódicas no se inscriben en ninguno de estos dos casos, sino que presentan una fenomenología más rica; para poder describirlos es necesario, por lo tanto, generalizar las fórmulas semiclásicas a sus condiciones.

Uno de los fenómenos más característicos de la transición de la integrabilidad al caos son las bifurcaciones: en un determinado momento de la transición, la órbita periódica se bifurca en varias, lo cual da lugar a un rápido incremento en su número. En general existen muchos tipos de bifurcaciones, pero éstas pueden clasificarse sin pérdida de información en cinco tipos.

En [45] se demuestra como cada uno de estos tipos contribuye con un término adicional a la fórmula de la traza de Gutzwiller. Si se considera un sistema con dos grados de libertad (un billar de dos dimensiones, por ejemplo), cada uno de los distintos tipos de bifurcaciones contribuye con un término de distinto orden en \hbar . El número total de términos diferentes es cuatro y el peso de sus contribuciones está entre el peso de las contribuciones de las órbitas inestables aisladas (sistemas caóticos) y el de las órbitas estables en familias (sistemas integrables).

A la vista de los resultados anteriores parece razonable suponer que cada tipo de bifurcación aporta un grado de repulsión y de rigidez espectral diferente. No obstante, para poder obtener expresiones para los estadísticos sería necesario conocer cuál es la medida relativa de cada tipo de bifurcación, así como si éstas son grandes

o pequeñas comparadas con las medidas asociadas a las regiones integrables y ergódicas del espacio de fases. No se conocen por el momento estudios genéricos sobre este tema.

Estadísticos fenomenológicos

Los estudios anteriores pretenden abordar la caracterización de los sistemas mixtos mediante la aplicación de conceptos y propiedades físicas. Existe, además, una segunda posibilidad, quizá menos satisfactoria desde el punto de vista conceptual, pero que muchas veces concuerda mejor con los resultados numéricos y experimentales: la construcción de estadísticos fenomenológicos.

El estadístico más importante y más utilizado para la caracterización de la transición de integrabilidad a caos para sistemas con simetría GOE, los más habituales, es la distribución de espaciamento de Brody, que interpola entre estos dos extremos [46]

$$P(s, \omega) = \alpha(\omega + 1)s^\omega \exp(-\alpha s^{\omega+1}), \quad \alpha = \left(\Gamma \left[\frac{\omega + 2}{\omega + 1} \right] \right)^{\omega+1}. \quad (2.84)$$

El parámetro ω varía entre $\omega = 0$, lo que da lugar a la distribución de Poisson, y $\omega = 1$, que corresponde a la distribución de Wigner; la distribución exacta para el caso caótico se puede ajustar con $\omega = 0.957$.

Otra distribución fenomenológica muy utilizada es la distribución de Izrailev [47], que interpola también entre integrabilidad y caos, pero incluyendo más tipos de simetría (que dan lugar a repulsiones más intensas)

$$P(s, \beta_{ef}) = A_{\beta_{ef}} s^{\beta_{ef}} \exp \left(-\frac{\pi^2 \beta_{ef}}{16} s^2 - \left[B_{\beta_{ef}} - \frac{\pi \beta_{ef}}{4} \right] s \right). \quad (2.85)$$

En esta expresión, β_{ef} puede variar entre $\beta_{ef} = 0$, que corresponde a la distribución de Poisson, y $\beta_{ef} = \infty$, que da lugar a una repulsión infinita, esto es, a un espectro equiespaciado. Las dos constantes $A_{\beta_{ef}}$ y $B_{\beta_{ef}}$ se determinan por normalización: $\int_0^\infty ds P(s, \beta_{ef}) = 1$ y $\langle s \rangle = 1$.

No existen fórmulas de interpolación semejantes para los estadísticos $\Sigma^2(L)$ y $\Delta_3(L)$.

Capítulo 3

Autosimilaridad y series temporales

El objetivo fundamental de esta tesis doctoral es el estudio del espectro de energías de un sistema cuántico como si fuese una serie temporal, considerando la energía como análogo del tiempo. En este capítulo hacemos un breve repaso a las técnicas habituales de análisis de series temporales, poniendo especial énfasis en aquellas que se van a utilizar en los capítulos posteriores. Se pretende que el lector disponga de la información suficiente para comprender y apreciar los todos los resultados y su interpretación, así como la motivación que induce a comparar un espectro cuántico con una serie temporal. Al igual que en el capítulo anterior, se evitan los detalles matemáticos de dificultan la exposición; el lector interesado en tales detalles puede consultar la bibliografía.

3.1. Series temporales y espectros de energías

Imagine el lector que va a un hospital o a una consulta médica y que allí se le realiza un electrocardiograma, es decir, se registra la serie de latidos que da su corazón en función del tiempo. Una señal como esa recibe el nombre de *serie temporal*, ya que registra la evolución temporal de un fenómeno mediante una serie de puntos o medidas (en este caso, cada uno de los latidos cardíacos). Imagine ahora el lector que no se encuentra en un hospital sino en un laboratorio, y que se realiza el siguiente experimento: se introduce un núcleo atómico en un dispositivo experimental y se explora su estructura en función de la energía, de modo que todos los valores E_i a los cuales es posible excitar el núcleo desde su estado fundamental quedan registrados. Procedamos a continuación a comparar los resultados de los dos experimentos. En el primero se anotó cada valor temporal t_i en el que sucedía un latido; en el segundo, cada valor de energía E_i accesible al núcleo. A pesar de la gran diferencia entre los dos sistemas que se estudian, los dos experimentos dan un resultado muy parecido: una serie de señales distribuidas con un patrón regular y afectadas por ruido.

El experimento de registrar los latidos cardíacos en función del tiempo es una práctica habitual para diagnosticar enfermedades del corazón. Durante los últimos años se ha demostrado, además, que el análisis matemático de la señal resultante puede resultar de gran utilidad; como ejemplo significativo, en [48] se muestra que una señal procedente de un corazón enfermo tiene diferentes propiedades estadísticas que la procedente de un corazón sano. La explicación de este resultado es bastante sencilla: lo que se mide cuantitativamente en [48] es que el corazón sano trata de compensar cualquier pequeña arritmia, no sólo a escala local, sino a mucho más largo plazo; así, su ritmo tiende a ser lo más regular posible (una vez descontadas las variaciones debidas a cambio de actividad).

Procedamos ahora con un nuevo experimento. Imagine el lector que se le muestra una secuencia regular de sucesos (por ejemplo, una serie de marcas distribuidas con un cierto patrón en un folio) y que se le pide a continuación que la reproduzca de memoria. Por lo general, una persona no está capacitada para memorizar y reproducir con total exactitud algo como lo que se acaba de describir; es natural suponer, por lo tanto, que el resultado de este experimento ha de ser una secuencia que reproduce el mismo patrón que la secuencia original, pero afectada de ciertos errores aleatorios. En [49] se realiza un experimento como el que se acaba de describir y se analizan estadísticamente los errores cometidos por una serie de personas al tratar de reproducir de memoria la secuencia original; el resultado del análisis es que los errores no son totalmente aleatorios, sino que presentan una estructura muy parecida a las fluctuaciones en el ritmo cardíaco de un corazón sano. Al igual que ocurría en el caso anterior, la explicación de este resultado es bastante lógica y sencilla: la persona trata de reproducir una secuencia lo más parecida posible a la muestra, de manera que, si comete un error por exceso, tiende a cometerlo a continuación por defecto para compensar; además, como la persona tiene una visión global de la secuencia que está produciendo, esta compensación no se produce solamente de forma local, sino que aparece más o menos a todas las escalas.

Una vez comprendidos estos resultados, resulta muy interesante echar un nuevo vistazo a la figura 2.5, en la que se representan los espectros de energías de un oscilador armónico, un sistema caótico y un sistema integrable. En la citada figura se aprecia bastante bien que en el sistema caótico las desviaciones con respecto a la secuencia equiespaciada están compensadas: no hay ni espaciamientos muy grandes ni muy pequeños; en el espectro integrable, por el contrario, no hay visos de semejante compensación. En consecuencia, parece tentador suponer que el espectro caótico se comporta como la persona que trata de corregir sus errores o el corazón sano, mientras que el integrable se comporta más bien como un corazón enfermo.

Todos los experimentos que se acaban de comentar son muy complejos, su interpretación no es tan sencilla y sus resultados no son tan nítidos y concluyentes. No obstante, todos ellos resultan muy ilustrativos de cara a la analogía que pretendemos establecer y que será la base de todos los resultados que constituyen esta tesis

doctoral. *Un espectro cuántico no es muy diferente a una serie temporal, de modo que las técnicas que sirven para estudiar estas últimas pueden resultar muy útiles en el estudio de los primeros.*

Una forma un poco más formal de comparar ambas magnitudes es la que se propone a continuación. En [50] se presenta un algoritmo matemático para construir series temporales con propiedades estadísticas como las que presentan un corazón sano o un individuo que trata de corregir los errores. Si x_i es dicha señal para $t = i\Delta t$,

$$x_i = \sum_{k=1}^{M/2} \sqrt{\frac{1}{k}} \cos \left(\frac{2\pi k t_i}{T} + \phi_k \right), \quad 1 \leq i \leq M, \quad (3.1)$$

donde $T = M\Delta t$ es el periodo de la serie y la secuencia $\{\phi_k\}$ se puede generar al azar. Si comparamos esta expresión con la fórmula de la traza de Gutzwiller (2.53) particularizada, por ejemplo, para un billar rectangular

$$\tilde{N}(E) = 2 \frac{E^{1/4}}{\sqrt{2\pi^3}} \sum_p \frac{\gamma_p}{l_n^{3/2}} \cos \left(l_n E^{1/2} - \frac{3\pi}{4} \right), \quad (3.2)$$

se observa que el parecido entre ambas es evidente.

3.2. Autosimilaridad

En el capítulo anterior se vio que una de las características del caos en sistemas hamiltonianos es la complejidad de las trayectorias, que no constituyen un movimiento periódico ni multiperódico. Además de los sistemas hamiltonianos, en la naturaleza existen otros muchos fenómenos muy complejos en los que, de una manera o de otra, se manifiesta el caos: tráfico, sistemas biológicos, caudal de ríos, comportamiento humano, evolución del mercado de valores...; todos estos sistemas se caracterizan por una *trayectoria*¹ mucho más complicada que un movimiento multiperódico. A pesar de ello, no todo es desorden en el caos: hay algunas estructuras simples que emergen de la complejidad.

Una de las propiedades más ubicuas dentro de la complejidad del caos es la autosimilaridad. Este fenómeno consiste en la invariación frente al cambio de escala: el sistema se comporta de la misma manera a escalas grandes y a escalas pequeñas; el grado y tipo de desorden es el mismo. En realidad, ningún objeto físico presenta autosimilaridad matemática, ya que tarde o temprano aparece una escala límite (la constante de Planck, el tamaño de un átomo, la velocidad de la luz, el tamaño del universo...); pero esto no supone un grave inconveniente: se puede definir y

¹En este contexto, trayectoria significa evolución temporal de una variable cualquiera, como puede ser el caudal de agua o el precio de una acción en el mercado.

estudiar la autosimilaridad en un rango finito de escalas, de la misma manera que la limitación en el tiempo no impide el estudio de sistemas periódicos.

3.2.1. Leyes de potencias

La autosimilaridad se expresa matemáticamente mediante las leyes de potencias. Considérese un sistema físico descrito por la siguiente ley:

$$f(x) = c x^\alpha. \quad (3.3)$$

Si se estudia el mismo sistema en una escala diferente $y = \lambda x$, la ley que lo describe es exactamente la misma salvo una constante multiplicativa:

$$f(\lambda x) = c \lambda^\alpha x^\alpha = \lambda^\alpha f(x). \quad (3.4)$$

Por esa razón se dice que las leyes de potencias son invariantes de escala.

Las leyes de potencias aparecen de manera ubicua en la física: en leyes sencillas, como la gravedad newtoniana, o en fenómenos muy complejos, como las transiciones de fase de segundo orden. En el estudio de series temporales o procesos estocásticos, la autosimilaridad se define de forma estadística. Sea un proceso estocástico $X(t)$, es decir, una secuencia ordenada de variables aleatorias que pueden ser independientes o relacionadas entre sí; se dice que éste es autosimilar² si

$$\langle X(\lambda t) \rangle = \lambda^\alpha \langle X(t) \rangle, \quad (3.5)$$

donde $\langle \dots \rangle$ indica promedio sobre distintas realizaciones.

Las series temporales autosimilares aparecen en muchos fenómenos de la naturaleza. Los primeros trabajos sobre esta propiedad se deben a H. E. Hurst, que estudió el problema del almacenamiento de agua en un embalse. Hurst se dio cuenta de que la evolución temporal del volumen de agua almacenado en un embalse da lugar a una serie temporal autosimilar; a partir de este descubrimiento inventó la primera técnica de análisis basada en la autosimilaridad [51].

3.2.2. Movimiento browniano

A partir de los resultados de Hurst, la búsqueda de autosimilaridad en la evolución temporal de sistemas complejos se ha convertido en una herramienta fundamental: sirve tanto para una descripción cualitativa como para la predicción a medio o largo plazo. Hoy en día existen muchos modelos basados en variables aleatorias que

²Rigurosamente este tipo de procesos se denominan *autoafines*, ya que en ellos la autosimilaridad aparece solamente de forma estadística. En este trabajo no estableceremos diferencia alguna entre autosimilaridad y autoafinidad.

dan lugar a una señal también aleatoria con estructura no trivial. En este trabajo nos vamos a centrar únicamente en modelos sencillos que dan lugar a una señal autosimilar; una descripción más completa puede encontrarse, por ejemplo, en [52].

El paradigma de autosimilaridad en series temporales es probablemente el movimiento browniano (y su generalización, el movimiento browniano fraccionario). Considérese una partícula que avanza hacia la izquierda o hacia la derecha, de forma que en cada paso puede avanzar o retroceder una distancia ξ^3 . Al cabo de un cierto tiempo t , la posición de la partícula queda determinada por la suma de todos estos desplazamientos

$$X(t) = \sum_{i=1}^t \xi_i. \quad (3.6)$$

Si se supone que la secuencia de desplazamientos $\{\xi_i\}$ es una secuencia de variables aleatorias independientes generadas con una distribución de probabilidad cualquiera (que supondremos de media nula, para simplificar), es posible demostrar que

$$\langle |X(t) - X(t_0)| \rangle \propto |t - t_0|^{1/2}, \quad (3.7)$$

donde el valor medio se calcula tomando diferentes realizaciones del mismo proceso. A partir de este resultado podemos definir una función

$$f(\tau) = \langle |X(t + \tau) - X(t)| \rangle \propto \tau^{1/2}, \quad (3.8)$$

de forma que la autosimilaridad se manifiesta explícitamente según

$$f(\lambda\tau) = \lambda^{1/2} f(\tau). \quad (3.9)$$

Una forma sencilla de generalizar este proceso consiste en definir un nuevo proceso $X_H(t)$ tal que en él

$$f(\tau) \propto \tau^H, \quad (3.10)$$

donde $0 < H < 1$ [53]. Los procesos que cumplen esta condición se denominan *movimientos brownianos fraccionarios*.

En la figura 3.1 se muestran tres procesos $X_H(t)$ con $H = 0.1$, $H = 0.5$ y $H = 0.9$ respectivamente. En cada una de las figuras se ha añadido una ventana en la esquina superior derecha en la cual se muestra la misma señal ampliada; el lector puede apreciar gracias a ella que la señal es autosimilar, ya que su aspecto es el mismo con independencia de la escala. Además, en la citada figura se aprecia con nitidez que la señal se va volviendo más suave según se aumenta el exponente H , y también que para valores pequeños de H la tendencia a volver al origen $X = 0$

³Una manera sencilla de llevar a cabo este proceso consiste en lanzar una moneda al aire y desplazar la partícula a la izquierda o a la derecha según la moneda caiga de cara o de cruz.

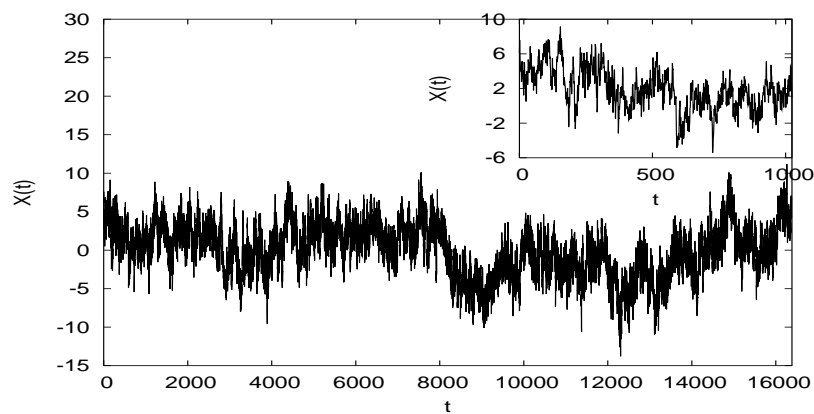
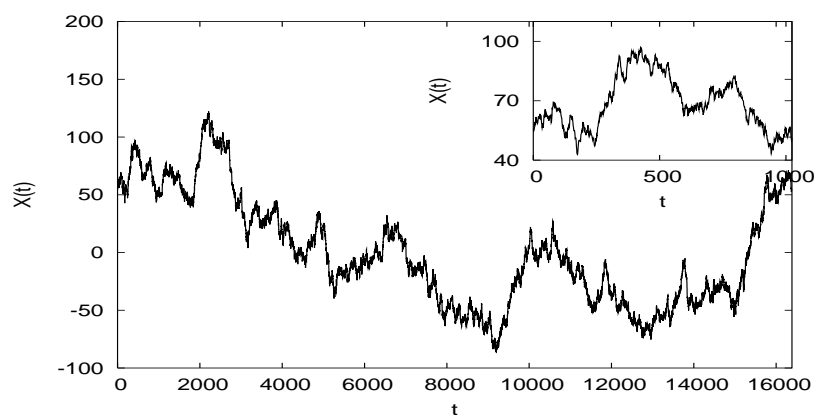
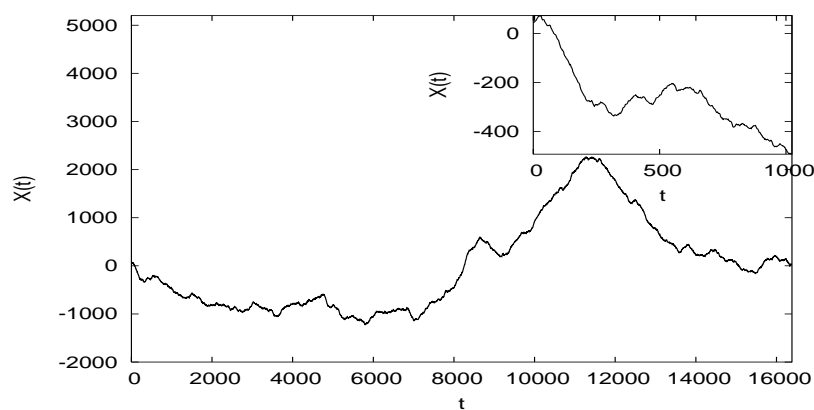
(a) Partícula con $H = 0.1$ (b) Partícula con $H = 0.5$ (c) Partícula con $H = 0.9$

Figura 3.1: Representación gráfica de una realización de un movimiento browniano fraccionario para tres diferentes valores de H . En los tres casos se adjunta un panel con una ampliación de la señal.

es mucho mayor que para valores grandes. Una forma de cuantificar esta última característica es mediante una función de correlación

$$C(t) = \frac{\langle X_H(-t)X_H(t) \rangle}{\langle X_H(t)^2 \rangle} = 2(2^{2H-1} - 1), \quad (3.11)$$

que mide la relación entre la posición de la partícula en dos instantes separados por un intervalo $\tau = 2t$. A partir del comportamiento de $C(t)$ se pueden establecer tres clases de procesos:

- $H < 1/2$. En este caso, la función de correlación es negativa, de forma que una trayectoria creciente⁴ en el pasado produce una trayectoria decreciente en el futuro, y viceversa. De una forma cualitativa, puede decirse que la partícula tiende a no alejarse mucho del desplazamiento medio, corrigiendo pequeñas desviaciones locales; se dice entonces que el movimiento es *antipersistente*.
- $H = 1/2$. En este caso, que corresponde al movimiento browniano normal, la función de correlación es nula, de forma que no hay correlación entre la posición de la partícula en dos instantes diferentes: la partícula se mueve a saltos completamente aleatorios.
- $H > 1/2$. En este caso, la función de correlación es positiva, de manera que si la trayectoria es creciente (o decreciente) en el pasado lo seguirá siendo también en el futuro. Al contrario que en el caso $H < 1/2$, esto de lugar a que la probabilidad de que la partícula se aleje del comportamiento medio sea bastante grande, ya que las pequeñas desviaciones locales no se corrigen sino que se incrementan; se dice, pues, que el movimiento es *persistente*.

La clasificación entre procesos persistentes, antipersistentes y neutros es muy útil de cara a su descripción cualitativa. Por ejemplo, muchos procesos relacionados con catástrofes naturales (como una crecida excesiva de un río, con las consiguientes inundaciones) están caracterizados por señales persistentes: una vez que la magnitud ha empezado a crecer, ésta tiende a seguir creciendo, agravando las consecuencias derivadas de ello⁵. Por el contrario, los procesos que involucran una autorregulación, como el control del ritmo cardiaco o la corrección de errores [48, 49], quedan caracterizados por señales antipersistentes.

⁴Dado que se está suponiendo que todos los procesos estocásticos involucrados son de media nula, una trayectoria creciente indica que la partícula tiende a moverse con saltos $\xi > 0$. En el caso más general, en el que no hay restricción alguna sobre el valor medio, este mismo comportamiento indica que la partícula tiende a moverse con saltos superiores al valor medio.

⁵Haciendo una interpretación humorística, se puede decir que este resultado justifica el dicho “las desgracias nunca vienen solas”.

3.2.3. Dimensión fractal

Una de las características más llamativas de algunos sistemas autosimilares es la dimensión fractal. Este concepto no se utiliza directamente en esta tesis doctoral (es decir, no se calculan explícitamente ni dimensiones fractales ni otras magnitudes asociadas a la geometría fractal), pero está claramente relacionado con algunos de los resultados obtenidos; por esa razón hemos decidido incluir este breve epígrafe sobre fractales, cuya lectura puede obviarse sin pérdida de continuidad.

Considérese una costa arriscada, con una línea muy compleja; la costa de Noruega, con sus fiordos, suele tomarse como paradigma [51]. Supóngase que se quiere medir la longitud de la citada línea de costa, y que para ello un observador recorre su contorno en un planisferio y suma la longitud de todos sus recovecos hasta obtener una buena aproximación (que depende de la precisión de la regla utilizada). Para comprobar la validez de esta aproximación, el observador puede sustituir el planisferio por un mapa local, que reproduce la misma línea de costa a mayor escala. En este nuevo mapa, las zonas que parecían rectas en el planisferio se muestran en realidad mucho más complejas, con multitud de recovecos muy semejantes a los que se habían medido con anterioridad; su consideración produce que la medida de la longitud aumente drásticamente. Para solventar esta dificultad, el observador puede volver a aumentar la precisión de la medida, hasta recorrer a pie la línea de costa para medir con precisión la contribución a la longitud total de todos los recovecos. En cada ampliación, la costa vuelve a mostrar complejidad en las zonas que parecían suaves, de modo que su longitud aumenta cada vez que se mejora la precisión de la medida, hasta el punto de resultar imposible establecer una cota superior como valor de la longitud de la costa.

El ejemplo que se acaba de poner muestra la relación entre autosimilaridad y fractales. Al igual que las series temporales expuestas en la figura 3.1, la costa de Noruega es autosimilar porque una ampliación tiene el mismo aspecto que la señal original, de forma que no es posible establecer una escala natural para las fluctuaciones. Al mismo tiempo, la costa de Noruega posee dimensión fractal, ya que es un objeto más grande que una curva (su longitud diverge al aumentar la precisión con la que se mide) y más pequeño que una superficie⁶; la única forma de describirlo es mediante una dimensión fraccionaria⁷.

El mismo procedimiento para medir la longitud puede aplicarse a las curvas presentadas en la figura 3.1. En todos los casos la longitud diverge al medirse con

⁶La superficie de la línea de costa puede medirse de la siguiente manera: en cada iteración se recubre la citada línea con patrones de superficie de un tamaño determinado (cuadrados de lado unidad, por ejemplo); el número de patrones necesarios para recubrir toda la línea da una medida de su área. Al aumentar la precisión de la medida (esto es, al disminuir el tamaño del patrón) se observa que la superficie disminuye hasta hacerse cero en el límite de precisión infinita.

⁷Para una explicación más detallada del concepto de dimensión fractal, así como para una definición matemática de la dimensión fraccionaria, véase, por ejemplo [51].

una precisión infinita; del mismo modo, su área se hace nula al incrementar la precisión. La razón de este comportamiento estriba en que existe una relación entre la dimensión fractal D de la representación gráfica de un proceso estocástico $X(t)$ y su exponente de Hurst H : $D = 2 - H$; en consecuencia, las tres curvas representadas en la figura 3.1 son objetos fractales, cuyas dimensiones son $D = 1.1$, $D = 1.5$ y $D = 1.9$ (casos $H = 0.9$, $H = 0.5$ y $H = 0.1$ respectivamente [51, 54]). Podemos concluir, por lo tanto, que las series antipersistentes son objetos con dimensión fractal próxima a dos (es decir, *casi superficies*), mientras que las series persistentes tienen dimensión próxima a uno (es decir, son *casi curvas*).

3.3. La transformada de Fourier

Una de las técnicas más habituales en el estudio de series temporales es la transformada de Fourier. Una serie temporal cualquiera (por ejemplo, cualquiera de las tres presentadas en la figura 3.1) puede descomponerse en varias señales simples, cada una de ellas caracterizada por un periodo T o por una frecuencia ω ⁸. La expresión matemática de esta descomposición es

$$X(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \hat{X}(\omega) e^{i\omega t}, \quad (3.12)$$

$$\hat{X}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt X(t) e^{-i\omega t}, \quad (3.13)$$

donde $X(t)$ es la señal original y $\hat{X}(\omega)$ la señal transformada.

En general, la función $\hat{X}(\omega)$ es compleja, de modo que no resulta de gran utilidad a la hora de describir una serie temporal real. Una buena simplificación consiste en utilizar en su lugar el *espectro de potencias*⁹, definido como el módulo al cuadrado de la transformada de Fourier

$$P(\omega) = \left| \hat{X}(\omega) \right|^2. \quad (3.14)$$

Esta magnitud indica la *potencia* asociada a cada frecuencia ω , de forma que es una buena medida del peso que cada señal de periodo ω lleva en la señal original.

El concepto de autosimilaridad presentado en la sección anterior puede trasladarse fácilmente a la transformada de Fourier de la señal. Se dice que una señal es

⁸En realidad, esta descomposición sólo puede realizarse para señales periódicas o de soporte finito. En el apéndice B estudiamos con detalle la aplicación de las técnicas de Fourier a procesos estocásticos.

⁹Traducción literal del inglés *power spectrum*. En la literatura puede encontrarse también como *densidad espectral*.

autosimilar si su espectro de potencias verifica

$$\langle P(\omega) \rangle \propto \omega^{-\alpha}, \quad (3.15)$$

donde el valor medio indica promedio sobre diversas realizaciones de un mismo suceso.

En general, se acepta que una señal autosimilar en el espacio de Fourier lo es también en su representación temporal: la relación entre la autosimilaridad en la señal original y en su espectro de potencias es $\alpha = 2H + 1$ [55] si $1 < \alpha < 3$; de esta manera, se considera que una señal es persistente si $\alpha > 2$ y que es antipersistente si $\alpha < 2$; los límites $\alpha = 3$ y $\alpha = 1$ pueden tomarse como los límites de persistencia y antipersistencia. No obstante, hay rigurosos estudios [50] que muestran que esa relación no es cierta en todos los casos y puede dar lugar a interpretaciones erróneas.

3.3.1. El ruido $1/f$

Una de las consecuencias más llamativas del uso del espectro de potencias en el estudio de series temporales es la terminología. Imagine el lector que se registran en un CD varias pistas correspondientes a diferentes señales acústicas, y que todas ellas se reproducen hacia adelante, hacia atrás y a varias velocidades con ayuda de un ordenador. En general, los cambios de velocidad o sentido de la reproducción en una señal cualquier tienen como consecuencia una impresión muy diferente al oído; sin embargo, si su espectro de potencias verifica (3.15), la sensación auditiva es la misma con independencia de la velocidad y el sentido de la reproducción. La forma habitual de referirse a las señales invariantes con respecto al modo de reproducción es mediante el término *ruido*.

La palabra ruido es casi ubicua en la literatura sobre series temporales y suele venir acompañada de un adjetivo que cataloga el tipo de señal. Según [56], los ruidos se pueden clasificar en función de α , de modo que: si $\alpha = 0$, la señal es un ruido blanco (por analogía con la luz blanca, que contiene la misma energía para todas las longitudes de onda); si $\alpha = 1$, la señal es un ruido rosa; si $\alpha = 2$, la señal es un ruido marrón¹⁰ (por analogía con el movimiento browniano); y si $\alpha = 3$, la señal es un ruido negro.

Entre todos los ruidos, el rosa o $1/f$ es el más importante, ya que aparece de una forma casi ubicua en la naturaleza (una buena colección de referencias se puede encontrar en [57]) y no se conoce ningún mecanismo físico sencillo que pueda explicar esta ubicuidad. Además, el ruido $1/f$ puede considerarse un límite, ya que separa las señales autosimilares estacionarias (con $-1 < \alpha < 1$) y las no estacionarias ($1 < \alpha < 3$), lo cual le imprime unas propiedades matemáticas muy interesantes.

¹⁰Del inglés *brown*.

Correlaciones y ruido $1/f$

Una forma alternativa de caracterizar matemáticamente las series temporales autosimilares es mediante el uso de funciones de correlación. Si la señal es estacionaria¹¹, es posible definir una función de correlación

$$R(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T dt X(t)X(t + \tau), \quad (3.16)$$

que se relaciona de forma sencilla con el espectro de potencias.

$$P(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau R(\tau) \cos(\omega\tau). \quad (3.17)$$

La sencilla relación entre la función de correlación y el espectro de potencias tiene como consecuencia que la autosimilaridad de la primera implica la autosimilaridad del segundo y viceversa; en concreto, si $P(\omega) \propto \omega^{-\alpha}$, entonces $R(\tau) \propto \tau^{\alpha-1}$, siempre y cuando $0 < \alpha < 1$; para $\alpha \geq 1$ las integrales divergen.

Para generalizar esta conclusión a una serie $f(t)$ no estacionaria conviene redefinir la función de correlación y evitar así las divergencias. Si tomamos la función

$$C(\tau) = 2 [R(0) - R(\tau)] = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T dt [X(t + \tau) - X(t)]^2, \quad (3.18)$$

el espectro de potencias queda determinado por

$$C(\tau) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega P(\omega) [1 - \cos(\omega\tau)]. \quad (3.19)$$

De este modo, si $P(\omega) \propto \omega^{-\alpha}$ entonces $R(\tau) \propto \tau^{\alpha-1}$, siempre y cuando $1 < \alpha < 3$.

A raíz de todo lo anterior se concluye que el ruido $1/f$ es un caso patológico, pues su función de correlación siempre diverge; no es posible considerarlo ni como un proceso estacionario ni como un proceso no estacionario. No obstante, esta divergencia puede eliminarse considerando una serie temporal discreta¹². Si en la ecuación (3.19) consideramos un ruido $1/f$ discreto (con un tiempo de muestreo t_{min}) y finito (con una longitud T), la función de correlación es

$$C(\tau) \propto \int_{\frac{2\pi}{T}}^{\frac{2\pi}{t_{min}}} d\omega \frac{1 - \cos(\omega\tau)}{\omega}, \quad (3.20)$$

¹¹De aquí en adelante se considerará que una señal es estacionaria cuando son estacionarios sus dos primeros momentos[52]. Se dice que una magnitud estadística cualquiera es estacionaria cuando sus propiedades son las mismas en diferentes puntos de la serie temporal.

¹²Desde un punto de vista experimental todas las series temporales son discretas, ya que se obtienen mediante un muestreo Δt .

que converge $\forall \tau$, Además, esta expresión admite el límite para series de longitud infinita $T \rightarrow \infty$, de modo que

$$C(\tau) \propto \int_0^{\frac{2\pi}{t_{min}}} d\omega \frac{1 - \cos(\omega\tau)}{\omega} = \int_0^{\frac{\tau}{\tau_{min}}} \frac{1 - \cos(x)}{x}, \quad (3.21)$$

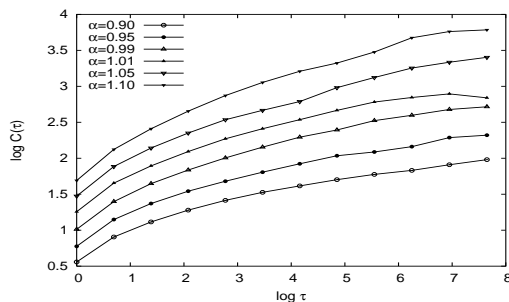
donde $\tau_{min} = 2\pi/t_{min}$. El resultado que se obtiene para la función de correlación así definida es

$$C(\tau) \propto Ci\left(\frac{\tau}{\tau_{min}}\right) + \gamma + \log(\tau) - \log(\tau_{min}), \quad (3.22)$$

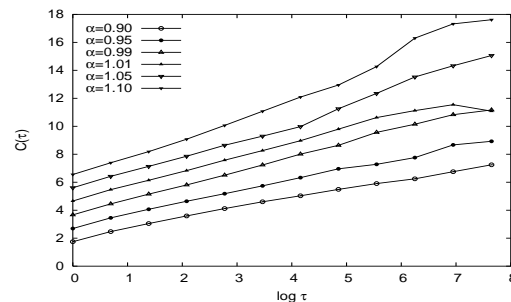
de modo que

$$C(\tau) \propto \log(\tau), \quad \frac{\tau}{\tau_{min}} \gg 1. \quad (3.23)$$

A partir de este resultado se puede concluir en primer lugar que el ruido $1/f$ sólo puede existir en series discretas, ya que se necesita una cota superior en frecuencia (o, lo que es lo mismo, una cota inferior en periodo de oscilaciones) para que no se produzca una divergencia en la función de correlación. Además, la expresión anterior muestra que este tipo de señales no son autosimilares; pueden considerarse, empero, un extraño límite entre las señales autosimilares estacionarias y las señales autosimilares no estacionarias (que se denominan a veces *ruidos* y *movimientos* respectivamente [58]).



(a) Función de correlación $C(\tau)$ en escala doble logarítmica.



(b) Función de correlación $C(\tau)$ en escala $\log(\tau)$ vs. $C(\tau)$

Figura 3.2: Función de correlación $C(\tau)$ para seis señales con espectro de potencias $P(\omega) \propto \omega^\alpha$ generadas mediante (3.1). En todos los casos se representan tan sólo unos pocos puntos para mayor claridad del resultado.

Esta conclusión es más o menos evidente, ya que emana directamente de la estructura de correlación del ruido $1/f$. No obstante, es muy habitual encontrar en la literatura trabajos en los que el ruido $1/f$ se considera y se analiza como autosimilar

y estacionario; en muchas ocasiones, incluso, se estudia su espectro fractal a base de ajustar funciones muy parecidas a $C(\tau)$ a una ley de potencias¹³ $C(\tau) \propto \tau^H$. La causa principal de estos errores se encuentra a nuestro juicio en la falta de artículos que alerten sobre esta peculiaridad: apenas en unas pocas referencias técnicas sobre ruido $1/f$ se hace mención a este fenómeno [59]. Por otro lado, también puede argüirse que el comportamiento logarítmico solamente aparece cuando $\alpha = 1$ de forma estricta, lo cual no va a ocurrir nunca en un análisis numérico.

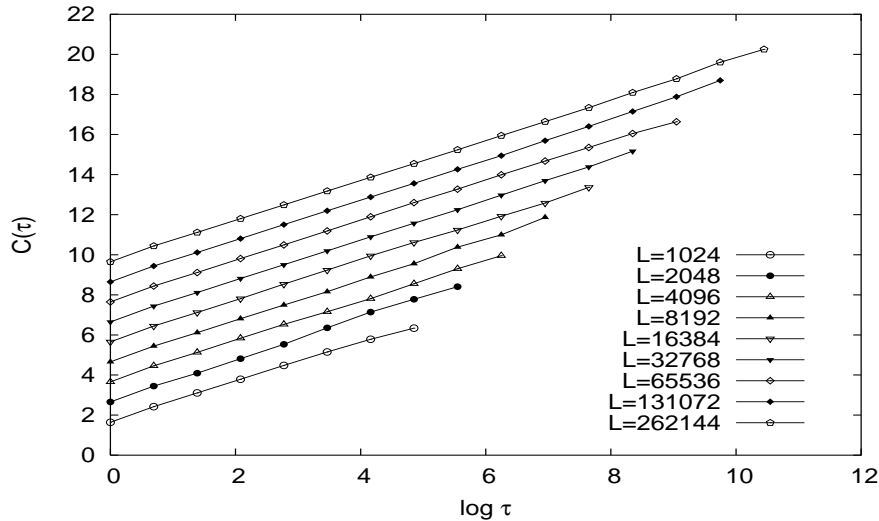


Figura 3.3: Función de correlación $C(\tau)$ para ruidos $1/f$ de diversa longitud L generados según la ecuación (3.1). En todos los casos se dibujan solamente unos pocos puntos para mayor claridad.

Presentamos a continuación unos pocos resultados para ilustrar la importancia del comportamiento logarítmico del ruido $1/f$. En la figura 3.2 se dibuja la función de correlación $C(\tau)$ para seis series temporales con $\alpha = 0.90$, $\alpha = 0.95$, $\alpha = 0.99$, $\alpha = 1.01$, $\alpha = 1.05$, $\alpha = 1.10$ respectivamente; todas ellas se han generado mediante la ecuación (3.1) con $L = 16384$; en todos los casos se han desplazado las curvas verticalmente para evitar solapamientos. Según la ecuación (3.19), todas estas series deberían dar lugar a una ley de potencias en la función de correlación¹⁴; si se representa en una escala doble logarítmica, la gráfica debería consistir en una línea recta con pendiente positiva para $\alpha > 1$ y negativa para $\alpha < 1$. En la figura, sin embargo, se manifiesta un comportamiento muy diferente: en la representación doble

¹³En general este tipo de ajustes no dan un error desproporcionado que pueda hacer sospechar que la ley de potencias no es adecuada. Si se realiza un ajuste lineal en escala logarítmica para valores altos de τ suele obtenerse $H \sim 0.1$ con cierta precisión.

¹⁴Nótese que en principio la ecuación (3.19) está definida para $1 < \alpha < 3$. No obstante, la integral puede calcularse también para $-1 < \alpha < 1$, obteniéndose el mismo resultado $C(\tau) \propto \tau^{\alpha-1}$.

logarítmica no se observa una línea recta, sino que en todos los casos se aprecia una curvatura importante; por el contrario, si se dibuja la gráfica en representación $C(\tau)$ vs. $\log(\tau)$ se aprecia que los puntos se distribuyen más o menos alrededor de una línea recta, de forma que todo parece indicar que $C(\tau) \propto \log(\tau)$. Esta anomalía es debida al tamaño finito y a la naturaleza discreta de las señales: en todos los casos $t_{min} = 1$ y $T = 16384$, de forma que las cotas superior e inferior para las frecuencias son $\omega_{min} = 2\pi/16384$, $\omega_{max} = 2\pi$. La conclusión es que en cualquier cálculo que involucre series temporales con $P(\omega) \propto \omega^{-(1\pm\epsilon)}$ ha de considerarse la posibilidad de que la función de correlación sea logarítmica.

En la figura 3.3 se representa la función de correlación $C(\tau)$ para ruidos $1/f$ estrictos generados mediante (3.1) para distintos tamaños L ; las curvas se muestran desplazadas en el eje vertical para evitar que se superpongan unas sobre otras. En esta ocasión se observa con nitidez el comportamiento logarítmico de la función de correlación; las anomalías a τ grande se deben al tamaño finito de las muestras: puede verse que según se aumenta L estas anomalías aparecen a mayor τ . Este resultado nos permite confirmar la conclusión anterior, según la cual las correlaciones logarítmicas y la ausencia de autosimilaridad en ruidos $1/f$ ha de tenerse muy en cuenta en cualquier cálculo numérico.

Capítulo 4

Caracterización de sistemas cuánticos caóticos e integrables

En el primer capítulo se mostró que el análisis de las fluctuaciones del espectro de energías es una de las herramientas más importantes para detectar el caos en mecánica cuántica. Este descubrimiento conllevó la definición de una serie de estadísticos adecuados para discernir entre los sistemas caóticos y los sistemas integrables; su aplicación ha servido durante los últimos veinte años para caracterizar el caos cuántico tanto en simulaciones como en medidas experimentales; el análisis de las fluctuaciones del espectro de energía puede considerarse, por lo tanto, una disciplina prácticamente cerrada. No obstante, la universalidad de ciertas propiedades de series temporales correspondientes a sistemas físicos de gran complejidad, como la autosimilaridad, incitan a preguntarse si las fluctuaciones que caracterizan el caos cuántico presentan también este tipo de propiedades; el interés en responder a esta pregunta radica en que, si esto fuera así, podría concluirse que la complejidad de un espectro cuántico (caótico o integrable) es muy similar a la complejidad de otros muchos fenómenos naturales y sociales. En este capítulo, que representa el cuerpo central de la presente tesis doctoral, se lleva a cabo el estudio de las fluctuaciones espectrales con técnicas habituales del análisis de series temporales. A partir del análisis de espectros procedentes de modelos teóricos, simulaciones o cálculos numéricos y datos experimentales se concluye que las fluctuaciones espectrales de los sistemas cuánticos presentan las mismas propiedades universales que las fluctuaciones características de muchos fenómenos naturales y sociales. Esta conclusión permite postular que la complejidad de los espectros cuánticos está organizada según patrones comunes a la complejidad que observamos todos los días a nuestro alrededor.

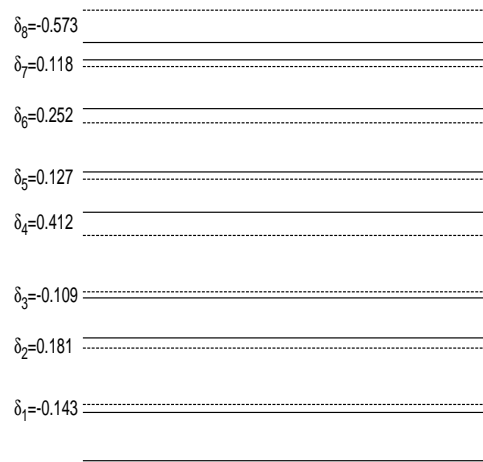


Figura 4.1: Comparación entre un espectro caótico (RMT) y un espectro equidistante: las líneas continuas constituyen el espectro caótico y las líneas discontinuas el espectro equidistante. La función δ_n muestra la distancia entre el n -ésimo nivel de ambos espectros.

4.1. La función δ_n

En la sección 3.1 se comentó que es posible establecer de forma natural una analogía entre el espectro de energías de un sistema cuántico y determinadas series temporales, como una secuencia de latidos cardiacos: la variable tiempo sobre la que se suceden los latidos del corazón puede considerarse equivalente a la variable energía sobre la que se suceden los niveles de un espectro. Por otro lado, en el capítulo 2 se vio que una de las características principales de los espectros de energías de los sistemas cuánticos caóticos es la rigidez espectral: la tendencia del espectro a parecerse lo más posible a un espectro equidistante, como el de un oscilador armónico. La conjunción de estos dos resultados proporciona una forma natural de estudiar las correlaciones entre los niveles de un espectro cuántico mediante una serie temporal que mida cómo se desvía el espectro en estudio de un espectro equidistante¹. En la figura 4.1 se muestra una forma sencilla de construir tal serie temporal: se define una función δ_n que mide la distancia del n -ésimo nivel de un espectro caótico ϵ_n con respecto al mismo nivel en un espectro equiespaciado $\bar{\epsilon}_n = n$.

La función δ_n permite estudiar las fluctuaciones de los espectros cuánticos mediante técnicas estándar del análisis de series temporales: basta considerar el índice n como un tiempo discreto. En la mayoría de las ocasiones, sin embargo, no es posible conocer experimentalmente el número de orden exacto de los niveles medidos;

¹Se está suponiendo que el espectro está reescalado de forma que $g(E) = 1$.

en general, se conocen tan sólo los niveles que se encuentran en una determinada ventana de energía, sin que haya información de ningún tipo sobre los niveles que están fuera de ella. Para poder aplicar la función δ_n a tales situaciones, es necesario definirla de una forma más precisa, de modo que la única información relevante sea la posición relativa entre los niveles (que es suficiente para calcular las correlaciones sin ambigüedad).

Sea una secuencia completa² de niveles $\{E_i\}$, reescalados según (2.69)

$$\epsilon_i = \overline{N}(E_i), \quad (4.1)$$

donde $i \in \{1, \dots, N\}$ representa el orden de los niveles conocidos, con independencia de su posición con respecto al estado fundamental. Considérese la secuencia de espaciamentos $\{s_i\}$, donde

$$s_i \equiv \epsilon_{i+1} - \epsilon_i. \quad (4.2)$$

A partir de ella, se define la función δ_n como

$$\delta_n = \sum_{i=1}^n (s_i - \langle s_i \rangle) = \sum_{i=1}^n \omega_i, \quad (4.3)$$

donde la ω_i es la fluctuación del i -ésimo espaciamento con respecto a su valor medio³.

Esta definición permite calcular la función δ_n para cualquier secuencia de niveles consecutivos, independientemente de su posición relativa en el espectro. Si se sustituye la definición de espaciamento (4.2) en la ecuación (4.3), la función δ_n resulta

$$\delta_n = \epsilon_{n+1} - \epsilon_1 - n. \quad (4.4)$$

Así pues, si se toma ϵ_1 como estado fundamental, δ_n representa la desviación del n -ésimo estado excitado con respecto a su valor medio, es decir, la desviación del n -ésimo estado excitado con respecto a un espectro equiespaciado.

La función δ_n es conocida dentro de la comunidad de caos cuántico [37], pero hasta este trabajo no se había utilizado nunca como estadístico. En su lugar, es relativamente frecuente encontrarla como herramienta para detectar niveles perdidos en un experimento o en una simulación [60], aunque esta técnica no siempre es fiable. En esta tesis doctoral utilizaremos el espectro de potencias de esta función, definido a partir de la transformada de Fourier,

$$\hat{\delta}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} \delta_n \exp\left(-\frac{2\pi i k n}{N}\right), \quad (4.5)$$

²Una secuencia finita E_1, \dots, E_N se dice *completa* si se conocen todos los niveles que la componen.

³De aquí en adelante se considerará que, debido al proceso de reescalado, $\langle s_i \rangle = 1$.

según

$$P_k^\delta = \left| \widehat{\delta}_k \right|^2, \quad (4.6)$$

para caracterizar las fluctuaciones de los sistemas cuánticos caóticos, regulares e intermedios, y veremos también que ese mismo estadístico sirve para detectar los efectos anómalos debido a propiedades específicas de cada sistema como las órbitas periódicas de periodo más corto.

4.2. Estudio de matrices aleatorias

La teoría de matrices aleatorias puede considerarse el paradigma del caos cuántico, ya que las fluctuaciones de su espectro de autovalores coinciden de forma genérica con las de los espectros de hamiltonianos cuánticos caóticos. En esta sección se utilizan diferentes colectividades de RMT para estudiar las correlaciones de los espectros cuánticos mediante la función δ_n . En primer lugar se estudian las colectividades Gaussianas (GOE, GUE, GSE, GDE), que son las más utilizadas en la literatura; una breve descripción de estas cuatro colectividades se presenta en la sección 2.3.4 y en el apéndice A. En segundo lugar se estudia la colectividad EGOE(2) (o TBRE), que se construye mediante la aplicación de una interacción a dos cuerpos aleatoria sobre un sistema finito de fermiones; la justificación y la definición precisa de esta colectividad se presentan en la sección correspondiente.

4.2.1. Colectividades Gaussianas

En esta sección se estudian las colectividades GOE, GUE, GSE y GDE. Los resultados permiten conjeturar la forma del espectro de potencias de la función δ_n para sistemas caóticos y regulares, y están publicados en la revista *Physical Review Letters* [38].

Cálculo de los autovalores

El estudio de los espectros de las cuatro colectividades Gaussianas mediante el espectro de potencias de la función δ_n es bastante sencillo. La expresión (2.67) proporciona directamente la distribución de probabilidad de la secuencia de autovalores, pero no es fácil de aplicar porque éstos no aparecen como variables aleatorias independientes. El método de cálculo utilizado en este trabajo consiste en generar cada uno de los elementos de matriz de forma independiente según las ecuaciones (2.64), (2.65) y (2.66) (la colectividad GDE se ha generado aplicando (2.64) tan sólo a los elementos diagonales de la matriz), y en diagonalizar a continuación las matrices resultantes mediante rutinas procedentes de la librería NAG [61]. Una simple manipulación en las ecuaciones anteriores permite comprobar explícitamente que los

elementos de la matriz son variables aleatorias independientes. En el caso del GOE, por ejemplo

$$P(H_{11}, \dots, H_{NN}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{N/2} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{N(N-1)/2} \prod_n \exp(-AH_{nn}^2) \prod_{n \neq m} \exp(-AH_{mn}^2). \quad (4.7)$$

Si se considera, además, que la simetría del hamiltoniano implica una matriz simétrica, es evidente que

$$\prod_{m \neq n} \exp(-AH_{nm}^2) = \left[\prod_{n < m} \exp(-AH_{nm}^2) \right]^2 = \prod_{n < m} \exp(-2AH_{nm}^2), \quad (4.8)$$

de forma que una matriz GOE puede construirse generando los elementos diagonales independientemente con una distribución de probabilidad

$$P(H_{ij}) = C \exp(-AH_{ij}^2), \quad (4.9)$$

y los no diagonales con

$$P(H_{ij}) = C \exp(-2AH_{ij}^2), \quad (4.10)$$

donde, en ambos casos, la constante C se determina por normalización.

En el caso de matrices GUE, el procedimiento es prácticamente el mismo, con la salvedad de que las partes real e imaginaria de cada elemento del hamiltoniano se generan también de manera independiente; la condición de hermiticidad se impone utilizando la misma relación entre los elementos diagonales y los no diagonales que en el GOE e imponiendo que los primeros sean reales.

El caso del GSE es un poco más complicado, ya que cada elemento del hamiltoniano es un cuaternión. No obstante, esta particularidad puede solventarse con facilidad considerando cada componente como una matriz 2×2 ,

$$H_{ij} = \begin{pmatrix} (H_0)_{ij} + i(H_3)_{ij} & (H_1)_{ij} + i(H_2)_{ij} \\ (-H_1)_{ij} + i(H_2)_{ij} & (H_0)_{ij} - i(H_3)_{ij} \end{pmatrix}; \quad (4.11)$$

calculando cada componente cuaterniónica independientemente respetando las simetrías del problema, que se manifiestan de la siguiente forma,

$$(H_0)_{ij} = (H_0)_{ji}, \quad (4.12)$$

$$(H_1)_{ij} = -(H_1)_{ji}, \quad (4.13)$$

$$(H_2)_{ij} = -(H_2)_{ji}, \quad (4.14)$$

$$(H_3)_{ij} = -(H_3)_{ji}; \quad (4.15)$$

e imponiendo la misma relación entre la distribución de probabilidad para elementos diagonales y no diagonales que en los casos anteriores. Nótese que de esta manera los elementos de la diagonal se reducen a números reales⁴.

La colectividad GDE, al estar compuesta por matrices diagonales, se genera de manera trivial.

Método de reescalado

Una vez generado el espectro de energías, el siguiente paso para estudiar sus fluctuaciones consiste en llevar a cabo el procedimiento de reescalado. Según se vio en el capítulo 2, en el caso de la RMT existe una fórmula cerrada para la densidad de estados (2.68), por lo que dicho procedimiento puede realizarse de una manera trivial. Con el fin optimarlo, resulta recomendable tomar $A = \nu/2$, de forma que la densidad de estados para GOE, GUE y GSE (nuevamente el caso del GDE es trivial) puede expresarse

$$\bar{g}(E) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \sqrt{2N - E^2}, & |E| \leq \sqrt{2N}, \\ 0, & |E| \geq \sqrt{2N}. \end{cases} \quad (4.16)$$

En todos los casos que se presentan en esta memoria el reescalado se ha realizado mediante la densidad acumulada, que se obtiene trivialmente de la expresión anterior

$$\bar{N}(E) = \begin{cases} 0, & E \leq -\sqrt{2N}, \\ \frac{E}{2\pi} \sqrt{2N - E^2} + \frac{N}{\pi} \arctan\left(\frac{E}{\sqrt{2N - E^2}}\right) - N/2, & |E| \leq \sqrt{2N}, \\ N, & E \geq \sqrt{2N}. \end{cases} \quad (4.17)$$

Estudio de la función δ_n

Una vez calculado y reescalado el espectro, el cálculo de la función δ_n para las cuatro colectividades mediante la ecuación (4.3) es trivial. En la figura 4.2 se representa la citada función para una realización de cada una de las cuatro colectividades. Una primera inspección visual muestra que el caso GDE es cualitativamente diferente a los otros tres: en este caso, la función δ_n es claramente menos picuda. Las colectividades GOE, GUE y GSE, por el contrario, dan lugar a unas fluctuaciones cuyo aspecto global apenas difiere: en todos los casos se aprecia una gran tendencia

⁴Con esta representación es evidente que un sistema de dimensión N se caracteriza por una matriz de dimensión $2N$. A pesar de ello, el número de autovalores sigue siendo N , ya que las simetrías impuestas producen que cada uno de ellos tenga degeneración dos.

a corregir pequeñas desviaciones con respecto a su valor medio; la principal diferencia es la amplitud de las fluctuaciones, que disminuye según aumenta la repulsión, tal y como era de esperar según las distribuciones de espaciamientos a próximos vecinos que se adjuntan en el apéndice A en las ecuaciones (A.7), (A.8) y (A.9). En las cuatro figuras se incluye una ventana en la que se representa la señal ampliada; gracias a ella se puede observar que el aspecto de la señal es parecido a diferentes escalas, por lo que es razonable pensar que la serie puede ser autosimilar. Además, una comparación con la figura 3.1 pone de manifiesto la gran similitud entre el caso GDE y una señal temporal con H próximo a 0.5; de igual modo es patente el parecido entre las otras tres colectividades y señales con H próximo a cero.

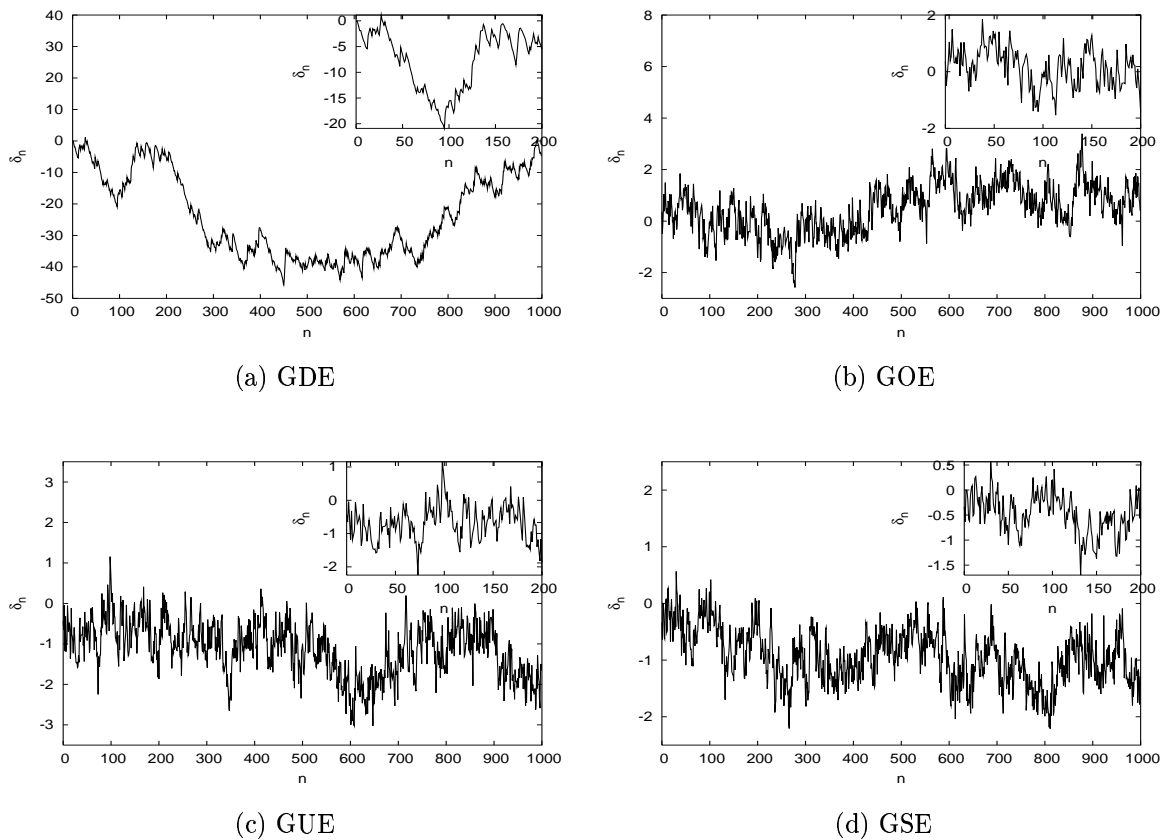


Figura 4.2: Función δ_n para una matriz GDE, GOE, GUE y GSE respectivamente. En cada panel, la ventana superior derecha muestra la misma señal ampliada.

Con el fin de estudiar de forma precisa el comportamiento de la función δ_n para cada una de las cuatro colectividades, realizamos el cálculo del espectro de potencias. Como se explica en la sección B.2 del apéndice B, el espectro de potencias debe

ser promediado con el fin de eliminar las fluctuaciones estadísticas, especialmente cuando éste se representa en escala logarítmica. En este caso hemos procedido de la siguiente forma:

1. Hemos generado 30 matrices diferentes para cada colectividad, las hemos diagonalizado y hemos reescalado cada uno de sus espectros mediante la expresión analítica para la densidad acumulada (4.17).
2. Hemos calculado la función δ_n para cada uno de los espectros.
3. Hemos calculado el espectro de potencias en cada caso, utilizando un algoritmo FFT para implementar la transformada de Fourier (véase apéndice B).
4. Hemos calculado el espectro de potencias medio de la colectividad, según se describe en la sección B.2.

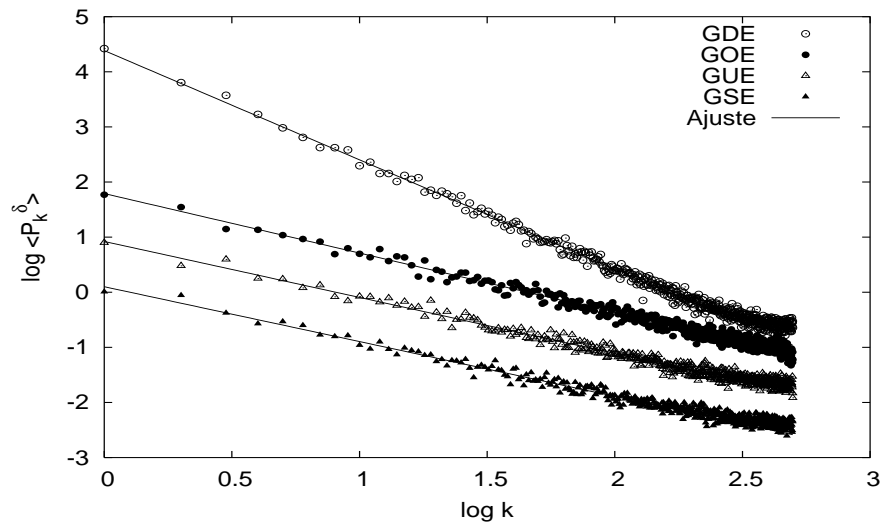


Figura 4.3: Espectro de potencias medio para las colectividades GOE, GUE, GSE y GDE, calculado utilizando 30 matrices para cada colectividad. Las líneas continuas representan el ajuste por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$.

En la figura 4.3 se representa el espectro de potencias obtenido según el procedimiento anterior para las cuatro colectividades en estudio. Lo primero que llama la atención es que en los cuatro casos los puntos siguen con bastante exactitud una línea recta, al menos para frecuencias suficientemente bajas; esto permite postular que el espectro de potencias es de la forma $\langle P_k^\delta \rangle = A/k^\alpha$. Las líneas rectas que se representan en cada uno de los casos son el resultado de un ajuste lineal por mínimos cuadrados para el que no se han considerado los puntos correspondientes

a las frecuencias más altas⁵; los resultados de dicho ajuste se presentan en la tabla 4.1.

Colectividad	α
GDE	1.982 ± 0.016
GOE	1.080 ± 0.016
GUE	1.016 ± 0.015
GSE	0.995 ± 0.015

Tabla 4.1: Valores del parámetro α para las colectividades GDE, GOE, GUE y GSE. El cálculo se ha realizado mediante ajuste por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$ del espectro de potencias medio de 30 matrices para cada colectividad.

La principal conclusión que se obtiene tras este cálculo es que existe una diferencia clara entre el caso regular y el caso caótico: el primero da lugar a un espectro de potencias $P_k^\delta \propto 1/k^2$, mientras que en el segundo $P_k^\delta \propto 1/k$; el primero es análogo a un movimiento browniano y el segundo a un ruido $1/f$. Como se ha dicho con anterioridad, la RMT se considera el paradigma del caos cuántico; resulta razonable pensar por lo tanto que los resultados que se acaban de obtener son representativos no solamente de las colectividades Gaussianas de matrices aleatorias, sino del caos cuántico en general. A lo largo de las próximas secciones abordaremos esta cuestión en otros sistemas mediante el análisis de otras colectividades de matrices aleatorias y de diversos sistemas físicos caóticos y regulares.

Por otro lado, el hecho de que P_k^δ se describa con una ley de potencias, junto con el aspecto de la función δ_n para los casos en estudio, permite establecer un vínculo entre la rigidez espectral, característica del caos cuántico, y la antipersistencia. La rigidez espectral, cuya principal consecuencia es que el espectro de energías tiende a parecerse al de un oscilador armónico, se manifiesta en forma de antipersistencia, es decir, en la tendencia de la serie temporal (la función δ_n) a corregir las desviaciones con respecto a su valor medio. Más concretamente, puede considerarse que las series temporales correspondientes a sistemas ergódicos se encuentran en el límite de antipersistencia, ya que, como se vio en el capítulo 3, la antipersistencia aparece en las series cuyo espectro de potencias cumple $1 < \alpha < 2$. A ese respecto, sería interesante determinar con mayor exactitud si α es mayor o estrictamente mayor que 1 para las colectividades GOE, GUE y GSE; en los próximos capítulos abordaremos esta cuestión.

⁵En este caso se han eliminado todos los puntos tales que $\log k > 2.2$. No existe un criterio a priori para estimar esta cota.

4.2.2. Interacciones Gaussianas aleatorias

Las colectividades Gaussianas de la RMT resultan sorprendentemente eficaces en la descripción de los sistemas cuánticos caóticos, tanto los simples (de pocos grados de libertad, como los billares), como los complejos (de muchos grados de libertad, como el núcleo atómico). Sin embargo, estas colectividades son muy difíciles de justificar desde el punto de vista físico, ya que se basan en interacciones a N cuerpos (donde N es el número de partículas involucradas en el sistema), cuando las interacciones fundamentales de la naturaleza son siempre a dos cuerpos⁶. En esta sección estudiamos una nueva colectividad de matrices aleatorias, el EGOE(k)⁷, que se construye a partir de fuerzas aleatorias a k cuerpos. En los próximos apartados definimos y presentamos las propiedades más relevantes de esta colectividad; el lector interesado en un estudio más detallado puede consultar [62].

Definición y propiedades

Considérese un sistema finito, con l niveles energéticos sin degeneración y m fermiones sin espín. El espacio de Hilbert asociado a este sistema es de dimensión $N = \binom{l}{m}$, y cada uno de los vectores de la base se puede construir según

$$|\mu\rangle = \prod_{s=1}^m \mathcal{A}_{j_s}^+ |0\rangle, \quad j_1 < \dots < j_m, \quad j_s \in (1, l) \quad \forall s, \quad (4.18)$$

donde $\mathcal{A}_{j_s}^+$ crea una partícula en el nivel j_s .

Una interacción a k cuerpos sobre dicho sistema se define

$$V^{(k)} = \sum_{j_1 < \dots < j_k; i_1 < \dots < i_k} V_{j_1 < \dots < j_k; i_1 < \dots < i_k} \mathcal{A}_{j_1}^+ \dots \mathcal{A}_{j_k}^+ \mathcal{A}_{i_k} \dots \mathcal{A}_{i_1}, \quad j_k \in (1, l) \quad \forall k; \quad i_k \in (1, l) \quad \forall k, \quad (4.19)$$

donde \mathcal{A}_{i_k} destruye una partícula en el nivel i_k ; la interacción se dice de k cuerpos porque cambia k partículas de unos niveles a otros⁸. Si los elementos de la matriz $V^{(k)}$ en la base anterior son variables aleatorias generadas según la distribución de probabilidad y cumpliendo las simetrías del GOE, la colectividad resultante se denomina EGOE(k). La dimensión de $V^{(k)}$ en esta base es $D = \binom{l}{k}$.

⁶Existen también algunas interacciones fenomenológicas a más cuerpos, como las fuerzas nucleares de tipo Skyrme, que incluyen términos a tres cuerpos.

⁷Iniciales de inglés *Embedded Gaussian Orthogonal Ensemble*, que se puede traducir como *colectividad Gaussianas ortogonal embebida*; la razón de esta terminología se verá más adelante.

⁸Nótese que están también incluidos aquellos términos que mantienen las k partículas en sus respectivos niveles. Estos términos determinan la energía de cada configuración.

La matriz $V^{(k)}$ determina unívocamente el sistema, ya que contiene toda su información física; en particular, la posición de los l niveles de energía está determinada por el valor de sus elementos. A pesar de ello, en la mayoría de las ocasiones resulta mucho más útil expresar la matriz $V^{(k)}$ en la base del espacio de Hilbert, compuesta por los vectores $|\mu\rangle$

$$V_{\mu\nu}^{(k)} = \langle \mu | V^{(k)} | \nu \rangle. \quad (4.20)$$

En general, en esta nueva representación muchos de los elementos de la matriz son nulos, ya que un estado $|\mu\rangle$ no puede conectarse con cualquier otro estado $|\nu\rangle$ mediante una interacción a k cuerpos; concretamente, todos los elementos $V_{\mu\nu}^{(k)}$ que conectan estados que difieren en la posición de más de k partículas son nulos, ya que una interacción a k cuerpos puede cambiar a lo sumo la posición de k partículas. Sólo cuando el número de cuerpos de la interacción es igual al número de partículas, $k = m$, la matriz $V_{\mu\nu}^{(k)}$ no tiene elementos nulos⁹; por esa razón, se dice que las colectividades Gaussianas de la RMT corresponden a interacciones a m cuerpos.

La colectividad EGOE ha sido ampliamente estudiada a lo largo de los últimos años, en especial el caso EGOE(2), conocido también como TBRE¹⁰, correspondiente a interacciones a dos cuerpos. A pesar de ello, y al contrario de lo que sucede con las colectividades Gaussianas de la RMT, se conocen muy pocos resultados analíticos; entre ellos destacan:

- En el límite diluido, que corresponde a $(l, m) \rightarrow \infty$ con $m/l \rightarrow 0$, la densidad de estados es Gaussianas, no semicircular como en el GOE [63].
- Cuando $k < m$, las propiedades estadísticas de cada uno de los miembros de la colectividad no coinciden con las de la colectividad en su conjunto. Por esa razón se dice que el EGOE($k < m$) no es ergódico [64].
- En el límite $l \rightarrow \infty$, las fluctuaciones espectrales solamente siguen la estadística Wigner-Dyson si $2k > m$. Por debajo de ese valor comienza una transición hacia fluctuaciones tipo Poisson, que aparecen cuando $k \ll m \ll l$ [65].

Los resultados segundo y tercero son especialmente importantes a la hora de estudiar la función δ_n . La falta de ergodicidad es un grave inconveniente a la hora de

⁹Obviamente, un elemento puede ser nulo de forma accidental, ya que la suma

$$V_{\mu\nu}^{(k)} = \langle \mu | V^{(k)} | \nu \rangle = \sum_{j_1 < \dots < j_k; i_1 < \dots < i_k} \langle \mu | V_{j_1 < \dots < j_k; i_1 < \dots < i_k} \mathcal{A}_{j_1}^+ \dots \mathcal{A}_{j_k}^+ \mathcal{A}_{i_k} \dots \mathcal{A}_{i_1} | \nu \rangle \quad (4.21)$$

puede anularse sin necesidad de que todos sus elementos sean cero. No nos referimos aquí a este tipo de situaciones

¹⁰Iniciales del inglés *Two Body Random Ensemble*, que se puede traducir como *Colectividad de fuerzas aleatorias a dos cuerpos*.

describir un sistema físico concreto mediante las propiedades de la colectividad, ya que todo sistema es semejante a una realización, no a la colectividad en su conjunto. Este inconveniente puede solucionarse en principio reescalando cada espectro de forma independiente [62], pero eso no es en general sencillo: la propia no ergodicidad produce que no exista una expresión única para la parte suave de la densidad de estados. Por otro lado, el tercer resultado muestra que es necesario recurrir al límite $N \rightarrow \infty$ para obtener resultados significativos, de forma que cualquier computación queda afectada por efectos de tamaño finito. En la propia referencia [65] se postula que el acuerdo entre las colectividades Gaussianas y los niveles procedentes de física nuclear es debida al tamaño finito de las configuraciones con nucleones de valencia, que son las necesarias para calcular los niveles que se utilizan habitualmente para hacer estadística. En esta sección estudiamos las propiedades estadísticas tanto de la colectividad como de cada uno de sus miembros para diversos casos, tratando de solventar o ilustrar los problemas comentados dentro de nuestros límites computacionales.

Método de reescalado

El reescalado de espectros de matrices EGOE presenta dos importantes dificultades con respecto al reescalado de matrices GOE, GUE o GSE: la inexistencia de resultados analíticos y la no ergodicidad. En este trabajo hemos solventado la primera de las dificultades aproximando la densidad acumulada $\overline{N}(E)$ mediante un desarrollo en polinomios de Chebyshev, según lo explicado en el apéndice C; en [66] se sigue un procedimiento muy parecido. La falta de ergodicidad, por el contrario, no tiene una solución sencilla: en ningún caso es posible reescalar cada espectro mediante una función $\overline{N}(E)$ válida para toda la colectividad. En consecuencia, el proceso que hemos utilizado consiste en reescalar cada espectro individualmente mediante una aproximación en polinomios de Chebyshev; los posibles efectos espurios debidos a este proceso se comentan a continuación.

Comportamiento de la función δ_n al variar el número de cuerpos de la interacción

Según los resultados publicados en [65], las fluctuaciones espectrales de las matrices EGOE dependen de la relación entre el número de niveles l , el número de partículas m y el número de cuerpos de la interacción k ; en el límite $(l, m) \rightarrow \infty$ es de esperar una transición suave de la regularidad al caos. Los resultados numéricos muestran, sin embargo, que para valores razonables de (l, m) ¹¹ una interacción a dos cuerpos es suficiente para producir un espectro caótico, lo que está de acuerdo con

¹¹Entendemos por valores *razonables* aquellos que se pueden alcanzar en una simulación con un ordenador estándar.

los resultados obtenidos en física nuclear. A continuación estudiamos el comportamiento de δ_n para un caso $(l, m) = (13, 6)$, variando la interacción desde $k = 1$ hasta $k = 6$ cuerpos.

En la figura 4.4 se muestra la densidad de estados del sistema en estudio en función del número de cuerpos de la interacción para varios espectros de una misma colectividad. Esta magnitud no aporta información relevante sobre la estructura de correlación de las fluctuaciones, pero es de gran ayuda para comprender el problema de la falta de ergodicidad. El caso $k = 1$ es claramente el más complicado, ya que la diferencia entre los distintos casos es muy grande. En el caso $k = 2$ también se pueden apreciar importantes diferencias entre los distintos espectros, aunque éstas son ya mucho menores; en cualquier caso, es importante resaltar que la estadística de las fluctuaciones no está relacionada con la falta de ergodicidad, como veremos a continuación. En los casos con $k > 2$ se observa que las densidades de las distintas realizaciones se van pareciendo más entre sí según se aumenta el número de cuerpos de la interacción, hasta ser prácticamente la misma en el límite $k = m = 6$. La conclusión que se obtiene es que la falta de ergodicidad está directamente relacionada con el número de ceros de la matriz de la interacción en la base del espacio de Hilbert.

Una vez reescalados todos los espectros, calculamos el valor medio del espectro de potencias de la función δ_n para cada interacción como medida de la intensidad del caos; en esta ocasión hemos utilizado 30 matrices diferentes en cada caso. En la figura 4.5 se muestran los resultados obtenidos, junto con el mejor ajuste por mínimos cuadrados a una ley de potencias¹²; en la tabla 4.2 se presentan los resultados del ajuste. La principal conclusión que se obtiene es que el caso $k = 1$ es regular, mientras que todos los demás son caóticos, sin diferencias significativas entre ellos; esto pone de manifiesto que los resultados de [65] no se reproducen para (l, m) pequeños. Además, se aprecia con claridad que el caso $k = 1$ presenta efectos anómalos importantes a baja frecuencia, debidos con casi total seguridad a la falta de ergodicidad¹³.

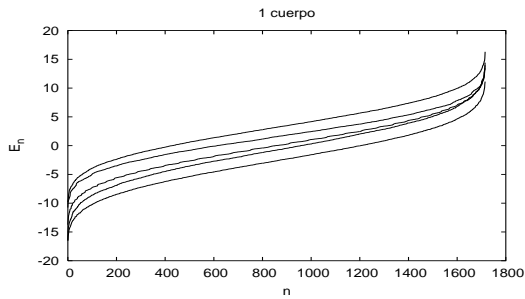
Caracterización del TBRE en función del número de niveles

La colectividad de interacciones aleatorias a dos cuerpos (TBRE) es especialmente interesante, ya que es la más razonable desde el punto de vista físico¹⁴. A

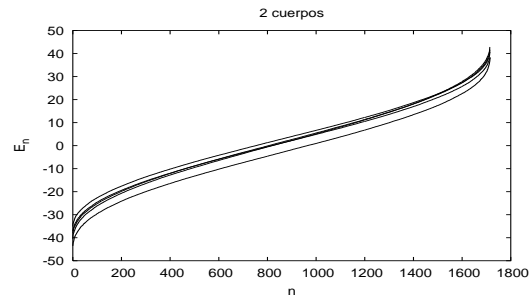
¹²El ajuste se ha realizado solamente en el rango de frecuencias en el que $\langle P_k^\delta \rangle \propto k^{-\alpha}$, es decir, se han descartado tanto las frecuencias muy bajas como las muy altas.

¹³Los efectos espurios debidos al proceso de reescalado son siempre más importantes en espectros regulares, ya que las grandes desviaciones con respecto a la media que caracterizan a éstas son especialmente sensibles al proceso de reescalado. Nótese que las bajas frecuencias se corresponden con las fluctuaciones de periodo grande, es decir, con aquellas en las que se manifiestan las grandes desviaciones con respecto al valor medio.

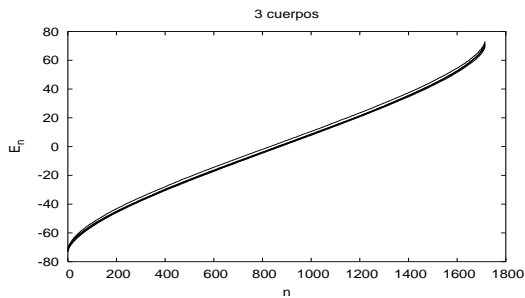
¹⁴La colectividad EGOE(1+2), es decir, la colectividad de matrices con interacciones aleatorias a uno y dos cuerpos, es incluso más representativa, pues prácticamente todos los modelos físicos



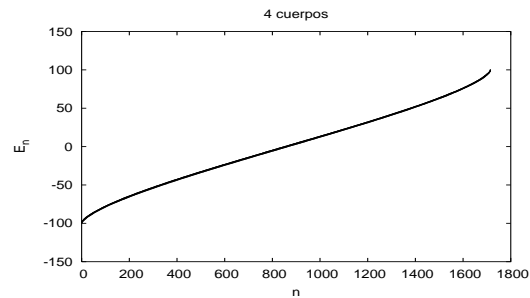
(a) Interacción a 1 cuerpo



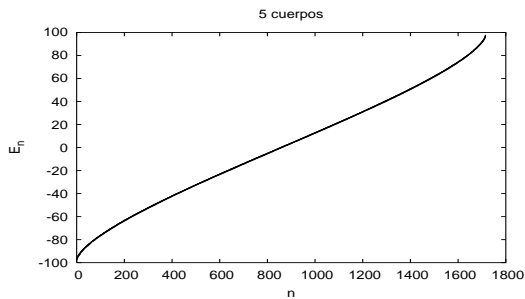
(b) Interacción a 2 cuerpos



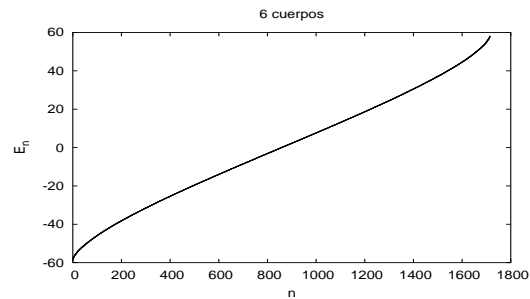
(c) Interacción a 3 cuerpos



(d) Interacción a 4 cuerpos



(e) Interacción a 5 cuerpos



(f) Interacción a 6 cuerpos

Figura 4.4: Densidad de estados para matrices EGOE $(l, m) = (13, 6)$ en función del número de cuerpos de la interacción. En cada panel se representan cinco realizaciones de cada colectividad.

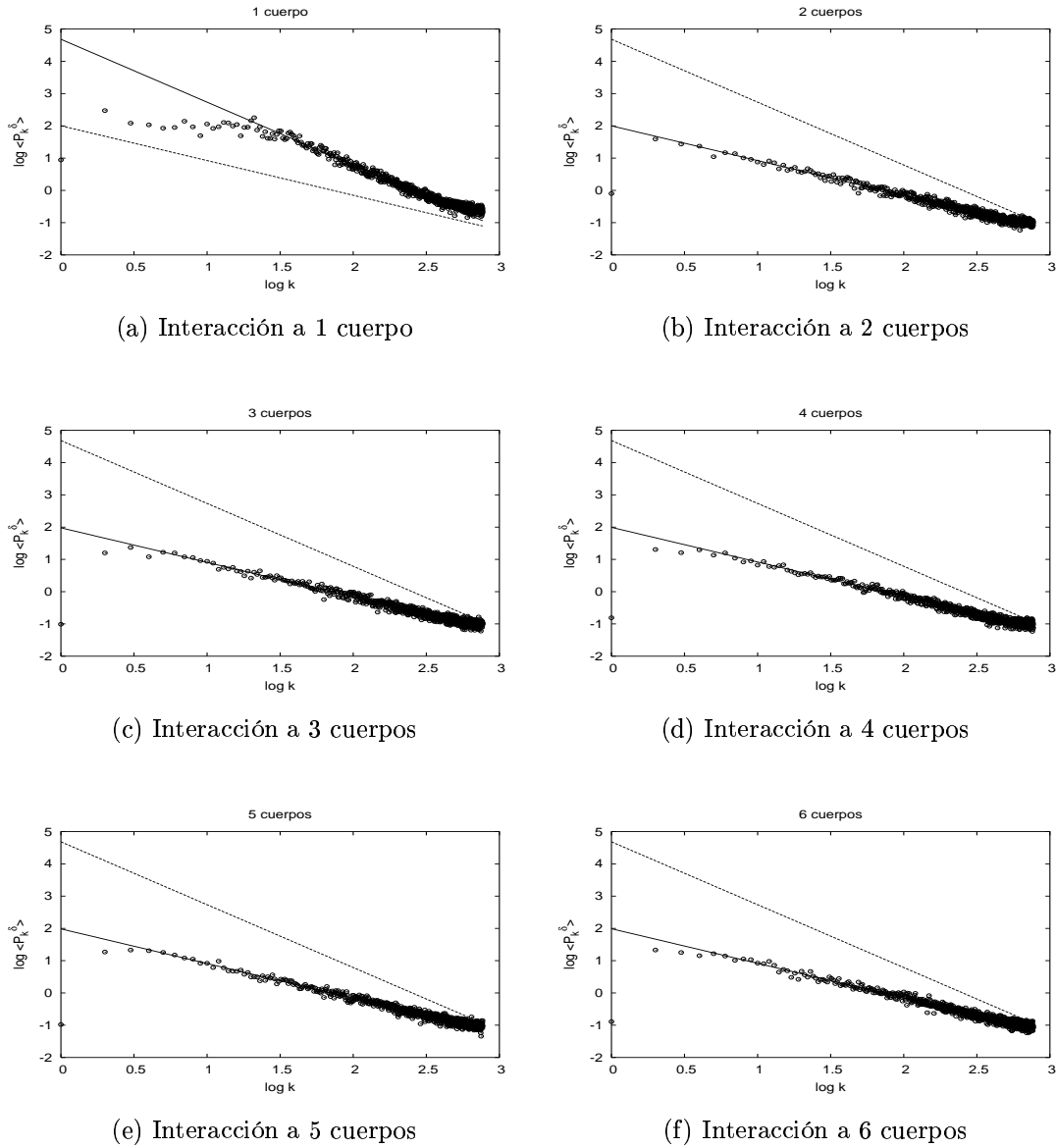


Figura 4.5: Espectro de potencias de la función δ_n para matrices EGOE $(l, m) = (13, 6)$ en función del número de cuerpos de la interacción. Las líneas corresponden al ajuste por mínimos cuadrados a leyes $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$: la línea continua representa el ajuste por mínimos cuadrados de cada caso concreto, y la línea discontinua el ajuste a un caso opuesto, es decir, caótico para el caso integrable e integrable para el caso caótico.

k	α
1	1.948 ± 0.021
2	1.076 ± 0.013
3	1.070 ± 0.013
4	1.074 ± 0.011
5	1.072 ± 0.011
6	1.073 ± 0.012

Tabla 4.2: Valor del exponente α en función del número de cuerpos de la interacción para matrices EGOE $(l, m) = (13, 6)$. El cálculo se ha realizado ajustando por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$ el espectro de potencias medio de 30 matrices para cada colectividad.

raíz de los resultados que se acaban de presentar, parece lógico suponer que todos los espectros de esta colectividad han de ser caóticos, con independencia del número de niveles y partículas del sistema¹⁵. A continuación estudiamos este problema con varios ejemplos, y caracterizamos tanto la colectividad en su conjunto como cada una de las matrices por separado. Parte de este trabajo está publicado en [67].

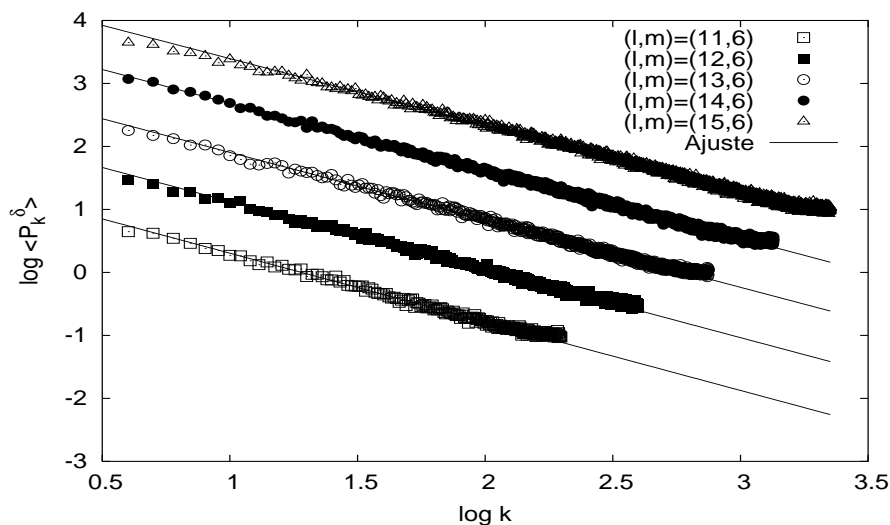


Figura 4.6: Espectro de potencias medio de 200 matrices para cinco colectividades TBRE de 6 partículas e interacción a dos cuerpos. Las líneas continuas representan el ajuste por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$.

En la figura 4.6 se representa el espectro de potencias de la función δ_n para cinco

incluyen este tipo de interacciones.

¹⁵Recuérdese que estamos considerando matrices de dimensión no muy grande, de forma que los resultados de Benet et. al [65] no son aplicables.

colectividades diferentes de 6 partículas con interacción a dos cuerpos. En los cinco casos el promedio se ha realizado sobre 200 matrices de la misma colectividad; esa es la razón por la cual las fluctuaciones con respecto al valor medio son menores que los ejemplos presentados con anterioridad. Además, los puntos se han desplazado horizontalmente para evitar solapamientos, y se han eliminado las frecuencias más bajas, que se desvían ligeramente del comportamiento lineal debido al proceso de reescalado. En la tabla 4.3 se resumen los resultados; en ella se puede ver que los valores obtenidos para α coinciden con los del caso anterior (colectividad $(l, m) = (13, 6)$ para $k \geq 2$ y con los que se obtuvieron para el GOE en la sección anterior.

(\mathbf{l}, \mathbf{m})	N	α
(11,6)	462	1.090 ± 0.011
(12,6)	924	1.081 ± 0.007
(13,6)	1716	1.071 ± 0.005
(14,6)	3003	1.073 ± 0.004
(15,6)	5005	1.057 ± 0.003

Tabla 4.3: Dimensión y valores de α para diversas colectividades TBRE de 6 partículas. El cálculo de α se ha realizado ajustando por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$ es espectro de potencias medio de 200 matrices para cada colectividad.

Además de la caracterización de las fluctuaciones espectrales de la colectividad en su conjunto, resulta muy interesante estudiar también las de cada uno de los miembros por separado; a fin de cuentas, un sistema físico (como un núcleo) se representa por una matriz, no por un conjunto de ellas. Para presentar toda la información de forma compacta y sencilla se ha procedido de la siguiente manera: se ha calculado el espectro de potencias de la función δ_n para cada miembro; se ha promediado cada uno de los resultados según el tercero de los procedimientos descritos en B.2; se ha ajustado cada caso a una ley $\langle P_k^\delta \rangle \propto k^{-\alpha}$, descartando las frecuencias más bajas y las más altas; y se ha construido un histograma en función del número de casos que se han encontrado para cada valor de α .

En la figura 4.7 se representan los resultados para las colectividades de 12 a 15 niveles según el procedimiento que se acaba de describir; en la tabla 4.4 se resumen los resultados. En todos los casos se observa que la distribución está centrada en un valor cercano al valor medio para toda la colectividad, y que la probabilidad de obtener valores de α alejados del valor medio es pequeña. Además, la dispersión disminuye de manera clara según se aumenta el número de niveles l (es decir, el tamaño de la matriz), lo que permite postular que para matrices suficientemente grandes todos los miembros de la colectividad deben presentar un exponente α muy próximo al del GOE. Por último, cabe resaltar que en todos los casos el histograma se ajusta muy bien a una Gaussiana con los parámetros que se presentan en la tabla

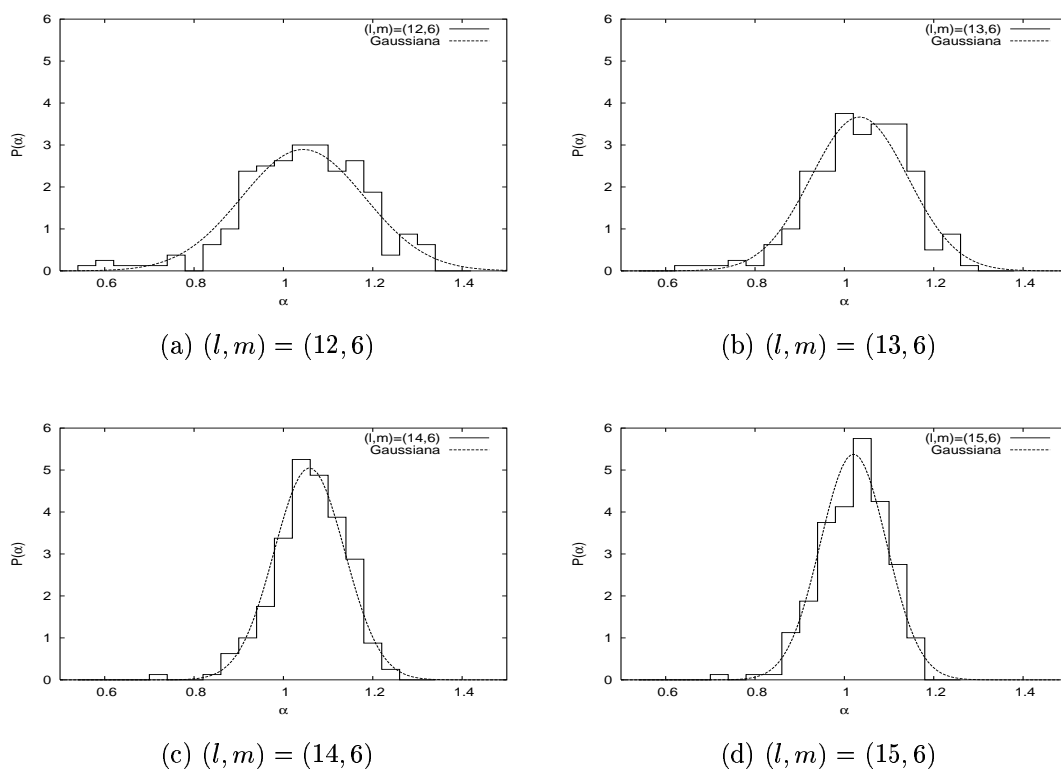


Figura 4.7: Probabilidad $P(\alpha)$ de obtener un valor determinado de α para distintas colectividades TBRE de 6 partículas. El histograma representa el resultado numérico y la curva una Gaussiana con los parámetros que se adjuntan en la tabla 4.4.

4.4.

Todos estos resultados nos permiten concluir que un sistema físico con interacciones a dos cuerpos y suficientemente complejo como para que una descripción mediante interacciones aleatorias resulte razonable debe presentar un ruido $1/f^\alpha$ con $\alpha \sim 1$ en las fluctuaciones de su espectro¹⁶. Además, podemos postular que las desviaciones que presenten los sistemas físicos con respecto a ese comportamiento pueden deberse a dos causas: efectos de tamaño finito, como un número pequeño de nucleones de valencia en el caso de la física nuclear, y el peso relativo del término a un cuerpo (la energía individual de cada una de las partículas constituyentes) con respecto a la interacción total.

¹⁶Si la dimensión del sistema es lo bastante grande, los resultados de Benet et. al [65] indican que el sistema debería comportarse como un espectro regular, es decir, su espectro de potencias debería ser de la forma $P_k^\delta \propto k^{-2}$.

(\mathbf{l}, \mathbf{m})	μ_α	σ_α
(12,6)	1.04	0.14
(13,6)	1.03	0.11
(14,6)	1.06	0.08
(15,6)	1.02	0.07

Tabla 4.4: Valor medio y dispersión de $P(\alpha)$ para diversas colectividades TBRE de 6 partículas. Los valores numéricos se han obtenido utilizando 200 matrices para cada colectividad.

4.3. Estudio de un sistema de muchos cuerpos: el núcleo atómico

Los resultados obtenidos con las colectividades EGOE y, en particular, con las EGOE(2) o TBRE, incitan a realizar el mismo estudio con un sistema físico de muchas partículas. El interés de este tipo de estudios es doble: por un lado comprobar si los resultados obtenidos con interacciones aleatorias son aplicables a una interacción determinada; por otro, determinar la existencia de caos en sistemas de muchas partículas, para los cuales la aproximación semiclásica presentada en el capítulo 2 no es aplicable. De entre todos los sistemas cuánticos de muchas partículas, quizá el más interesante es el núcleo atómico, ya que las interacciones entre nucleones se suponen muy complejas y, además, el sistema no posee un análogo clásico sencillo. En esta sección estudiamos las fluctuaciones espectrales de un núcleo atómico estable bastante típico: el ^{24}Mg ; los resultados obtenidos con él pueden considerarse representativos de un amplia variedad de núcleos atómicos. Parte de los resultados que aquí se presentan están publicados en [38].

Cálculo del espectro

El estudio de las fluctuaciones espectrales del núcleo atómico mediante datos experimentales es, en general, muy complicado. Al principio de la década de los ochenta, Haq, Pandey y Bohigas utilizaron 30 secuencias de 27 núcleos pesados para estudiar el acuerdo entre las fluctuaciones reales de los núcleos atómicos y las predichas por la RMT [68]. A pesar de la gran cantidad de datos experimentales disponibles, el estudio final se realizó solamente sobre 1407 niveles (correspondientes a resonancias de protones y de neutrones lentos), lo que da una media de 46.9 niveles por secuencia; la razón por la cual se utilizó un número tan pequeño de niveles es que todas las secuencias deben ser completas (sin niveles perdidos) y puras (con el mismo momento angular y paridad). Además, el estudio de regiones alejadas del umbral de emisión de neutrones, como la región del estado fundamental, resulta

prácticamente imposible desde este punto de vista¹⁷.

A la vista de lo anterior, lo más razonable para estudiar las fluctuaciones del espectro de energías es acudir a modelos teóricos, que permiten calcular un gran número de niveles consecutivos con paridad y momento angular bien definidos. En esta tesis doctoral, el cálculo del ^{24}Mg se realiza mediante una interacción realista basada en el modelo de capas. El modelo se construye utilizando un corazón de ^{16}O (8 protones y 8 neutrones) y considerando que el resto de los nucleones se mueven en las capas $0d_{5/2}$, $1s_{1/2}$ y $0d_{3/2}$, es decir, en la capa sd . La interacción consta de una parte de campo medio, caracterizada por las energías de partícula independiente $\epsilon_{0d_{5/2}}$, $\epsilon_{1s_{1/2}}$ y $\epsilon_{0d_{3/2}}$, ajustadas a partir de datos experimentales de la capa sd , y de un término a dos cuerpos de Wildenthal, conocido como interacción W o USD , que incluye una dependencia en el número másico de la forma $(\frac{18}{A})^{0.3}$ [69]. La diagonalización del hamiltoniano, que es diagonal por cajas con buen momento angular J , se ha llevado a cabo mediante el código NATHAN [70]. Las dimensiones y el valor del momento angular de cada una de las cajas se resumen en la tabla 4.5.

J	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N	325	779	1206	1304	1311	1070	835	531	329	154	70

Tabla 4.5: Valores del momento angular J y la dimensión de cada submatriz asociada a dicho valor para el ^{24}Mg calculado considerando solamente la capa sd .

Método de reescalado

La parte suave de la densidad de estados se conoce con bastante aproximación para hamiltonianos basados en el modelo de capas; en general, el ajuste a los datos puede hacerse mediante funciones conocidas dependientes de pocos parámetros libres (en el apéndice C se presentan brevemente los resultados conocidos). En esta tesis doctoral, sin embargo, hemos preferido utilizar la aproximación en polinomios de Chebyshev (que se detalla en el apéndice C), ya que ésta se ha mostrado muy eficaz en una amplia variedad de sistemas. Según el resultado de la figura C.4, hemos escogido un orden máximo $k = 10$ en el desarrollo en estos polinomios; no hemos ido más allá debido a la pequeña dimensión de algunas de las matrices. Para asegurarnos de la validez del método empleado, hemos comparado este procedimiento de reescalado con una expansión de Edgeworth hasta cuarto y sexto cumulantes [39], así como con órdenes de Chebyshev próximos a $k = 10$; los resultados obtenidos mediante los distintos procedimientos son indistinguibles.

¹⁷Existen algunos resultados experimentales para el ^{26}Al y el ^{116}Sn , pero en ninguno de los dos casos el número de niveles es muy elevado.

J	α
0	1.1 ± 0.3
1	1.05 ± 0.20
2	1.12 ± 0.11
3	1.05 ± 0.12
4	1.04 ± 0.08
5	1.08 ± 0.08
6	1.09 ± 0.15
7	1.11 ± 0.10
8	1.20 ± 0.20
9	1.5 ± 0.7

Tabla 4.6: Valores del exponente α para los distintos espectros con momento angular J bien definido del ^{24}Mg . El cálculo se ha realizado ajustando cada espectro de potencias a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$ por mínimos cuadrados.

Estudio de la función δ_n

Una vez calculados y reescalados los espectros procedemos al estudio de la función δ_n . En primer lugar, estudiamos cada espectro con momento angular J bien definido por separado. Cada uno de estos espectros puede considerarse como una realización de una matriz EGOE(1+2), ya que es el resultado de distribuir un número finito de partículas (los nucleones de valencia) en un número finito de niveles (los de la capa sd); la única particularidad es que en este caso se seleccionan los estados en función de su momento angular, su paridad y su isoespín.

En la figura 4.8 se muestra el aspecto de la función δ_n para los espectros con $J = 0, \dots, 9$; el caso $J = 10$ no se ha considerado porque su dimensión es demasiado pequeña. En todos los casos se observa que la gráfica fluctúa en torno al valor medio sin grandes desviaciones, tal y como se espera de un espectro caótico.

En la figura 4.9 se muestra el espectro de potencias de la función δ_n para cada uno de los casos anteriores; el resultado del cálculo se presenta con puntos unidos por una línea poligonal y el ajuste por mínimos cuadrados mediante una línea discontinua; cada uno de los espectros de potencias se ha promediado utilizando el tercero de los procedimientos descritos en B.2. En todos los casos se observa un buen acuerdo entre la ley $\langle P_k^\delta \rangle \propto k^{-\alpha}$ y el resultado del cálculo, salvo en el espectro correspondiente a $J = 9$, que se compone tan sólo de 154 niveles. Los valores del exponente α para cada caso se muestran en la tabla 4.6. Todos los resultados son compatibles con $\alpha \sim 1$, aunque el caso $J = 9$ no es significativo por el gran valor del error.

Los resultados que se acaban de presentar sirven para caracterizar las fluctuaciones de cada uno de los espectros con J bien definido de forma individual, pero, quizá, resulta más interesante caracterizar el ^{24}Mg de manera global. Una forma

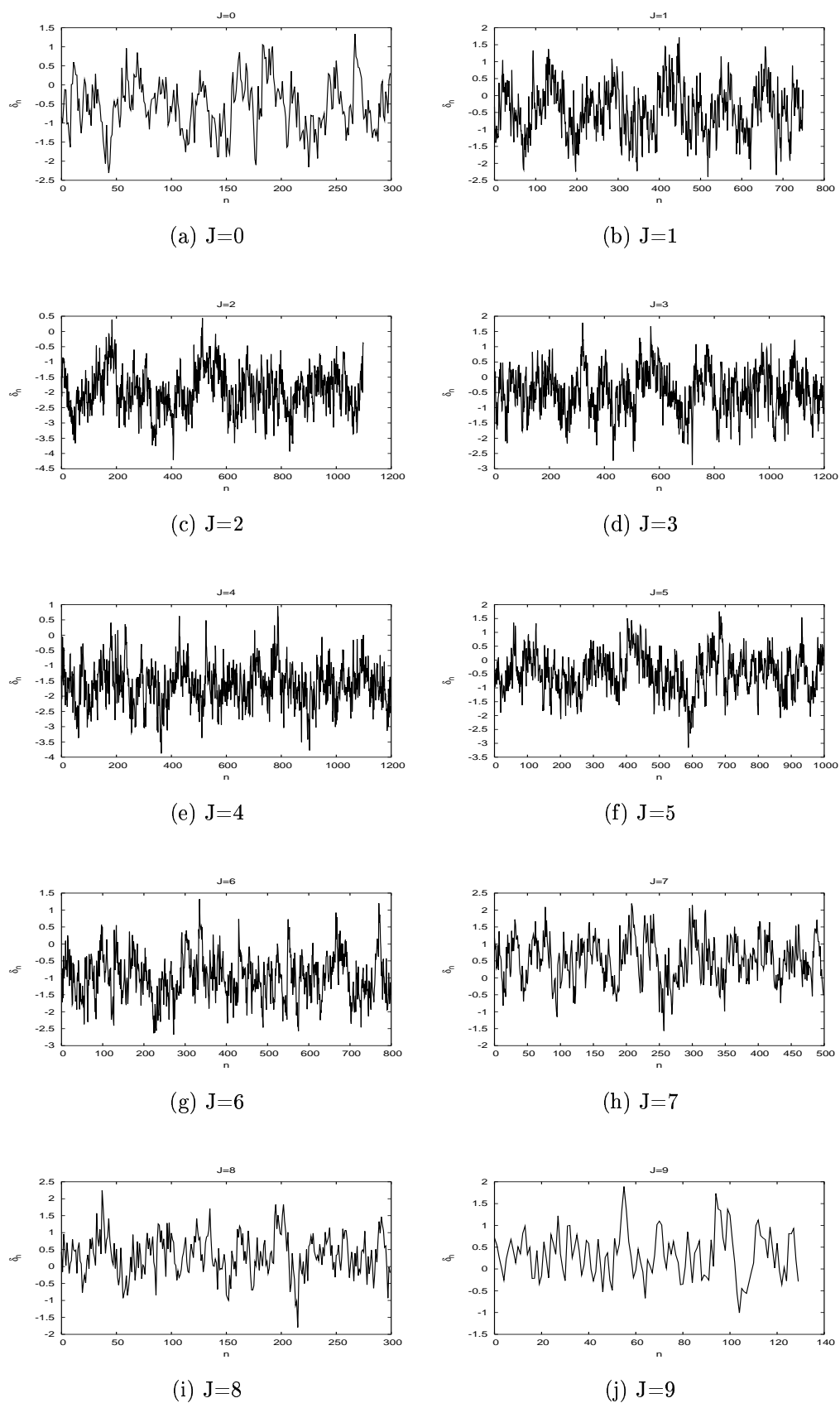


Figura 4.8: Función δ_n para 10 subspectros con momento angular J fijo del ^{24}Mg

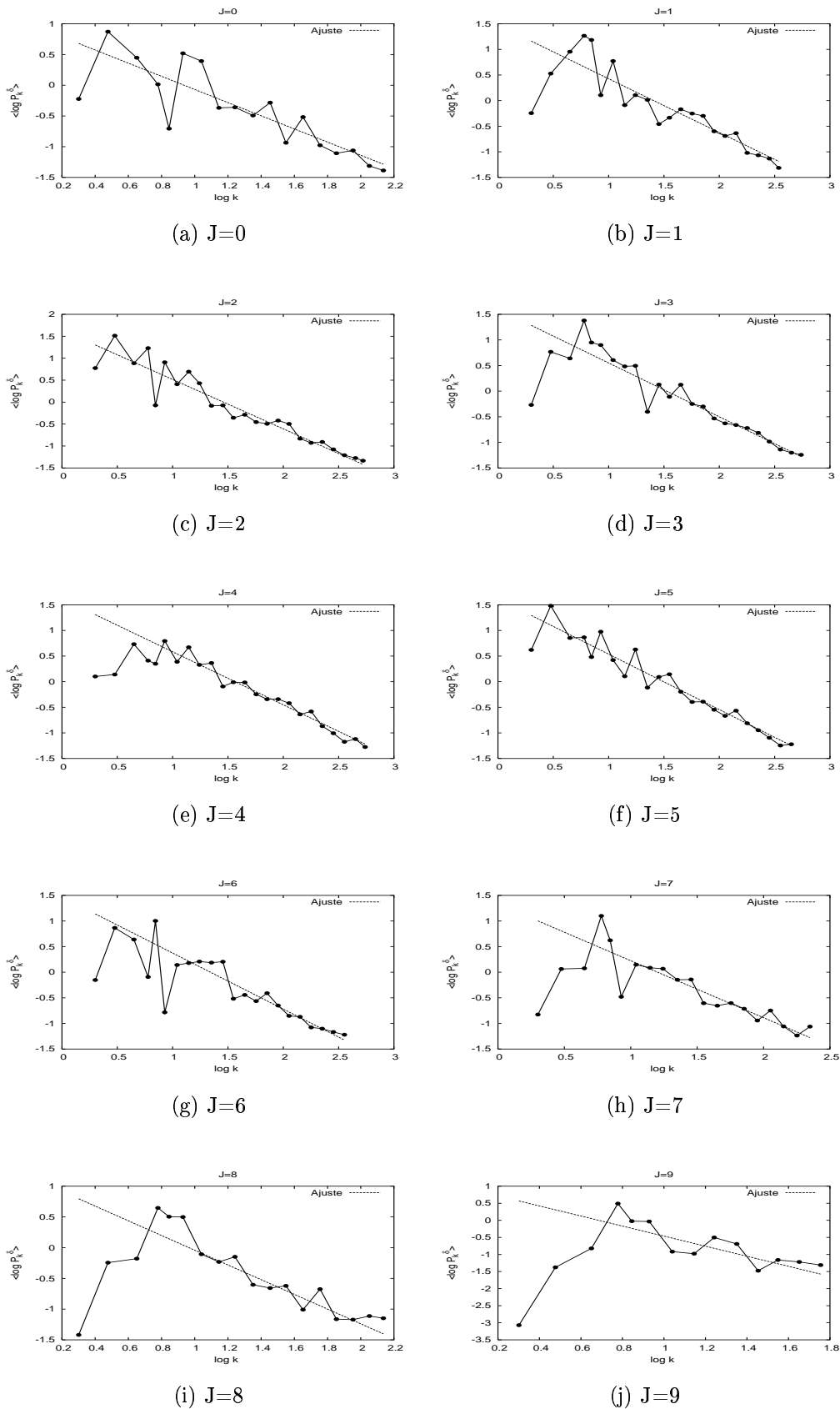


Figura 4.9: Promedio del espectro de potencias de la función δ_n para 10 subespectros con momento angular J fijo del ^{24}Mg

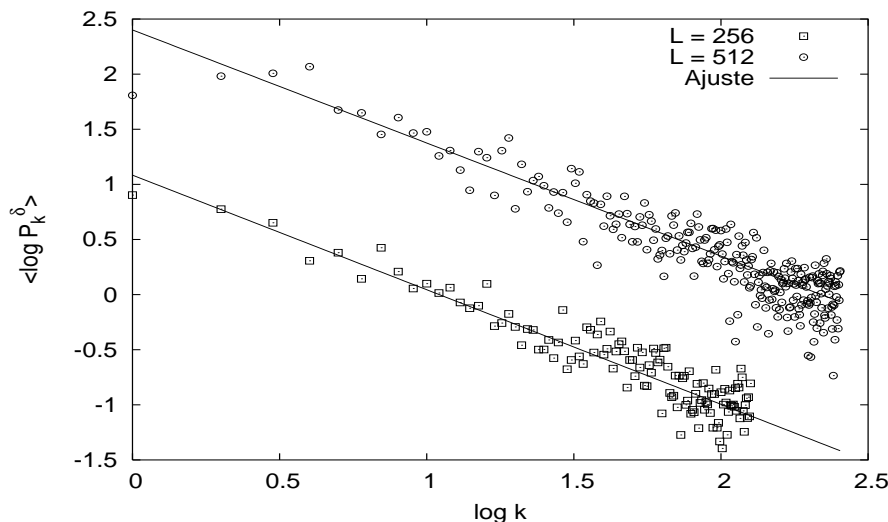


Figura 4.10: Espectro de potencias promedio del ^{24}Mg calculado utilizando todas las secuencias existentes con J fijo y longitudes $L = 256$ y $L = 512$ respectivamente.

sencilla de hacer esa caracterización es mediante una media ponderada de los resultados anteriores, pesando cada espectro según su número de niveles. El resultado de dicho cálculo es:

$$\langle \alpha (^{24}\text{Mg}) \rangle_J = 1.09 \pm 0.14.$$

Otro procedimiento para caracterizar las fluctuaciones del ^{24}Mg como un todo consiste en calcular un espectro de potencias promedio y luego calcular el exponente α del resultado, tal y como se hizo para las distintas colectividades de matrices aleatorias. En el caso del ^{24}Mg , y en general de cualquier núcleo atómico, este procedimiento presenta, no obstante, una importante dificultad de naturaleza conceptual: no es posible promediar sobre diferentes *realizaciones* del mismo sistema, ya que la interacción no es aleatoria. A la vista de los resultados anteriores, una posible solución consiste en promediar sobre diferentes valores del momento angular J , ya que se ha demostrado que las propiedades estadísticas de sus espectros son muy similares; sin embargo, la diferente dimensión de cada espectro impide realizar ese promedio de manera sencilla. Para solucionar esta nueva dificultad, hemos procedido de la siguiente manera a) hemos seleccionado una determinada longitud L ; b) hemos dividido todos aquellos espectros que verifican $N \geq L$ en fragmentos de L niveles consecutivos, todos ellos con la misma paridad y momento angular; y c) hemos considerado todos los fragmentos resultantes como miembros de una misma colectividad. En la figura 4.10 se dibujan los resultados para el espectro de potencias promedio calculado con $L = 256$ y $L = 512$; en la tabla 4.7 se presentan los valores del exponente α junto con el número N de espectros considerados en cada promedio. Nuevamente se obtienen resultados compatibles con $\alpha \sim 1$.

L	Secuencias	α
256	25	1.04 ± 0.09
512	10	1.03 ± 0.05

Tabla 4.7: [Valores del exponente α para el ^{24}Mg promediado utilizando espectros de longitud $L = 256$ y $L = 512$. El cálculo se ha realizado ajustando el espectro de potencias medio a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$.

Todos los resultados obtenidos en esta sección son compatibles con los obtenidos en la sección anterior, al estudiar la colectividad TBRE, y también con el hecho de que los sistemas cuánticos caóticos están caracterizados por $\alpha \sim 1$. Cabe destacar, además, que en ningún momento se han encontrado efectos anómalos a baja frecuencia correspondientes a las escalas en las que las fluctuaciones no son universales; esto pone de manifiesto que las órbitas periódicas de periodo corto no tienen gran relevancia en los sistemas cuánticos complejos de muchas partículas.

4.4. Estudio de billares cuánticos

Los billares cuánticos son considerados por muchos autores como el paradigma del caos en mecánica cuántica. En 1984 Oriol Bohigas y sus colaboradores se basaron en los resultados obtenidos en un billar de Sinai para formular la conjetura BGS, que establece la universalidad de las fluctuaciones del espectro de energía de los sistemas cuánticos caóticos [23]. En este histórico artículo, Bohigas y sus colaboradores justificaron la elección de un billar como representante de los sistemas cuánticos caóticos por medio de tres razones que siguen considerándose válidas hoy en día:

- Los billares tienen el menor número de grados de libertad compatible con el movimiento caótico. Esta propiedad permite aplicar con gran facilidad y eficacia todos los resultados semiclásicos que se resumieron en el capítulo 2, en particular los referentes a las órbitas periódicas del análogo clásico del sistema.
- En los billares es siempre posible separar las partes suave y fluctuante de la densidad por medio de la fórmula de Weyl [26]. Esta propiedad permite estudiar tanto la universalidad como los efectos anómalos de las fluctuaciones sin ambigüedades o efectos espurios relacionados con el proceso de reescalado.
- Los billares tienen un espectro discreto, infinito y que se puede calcular con gran precisión hasta valores muy elevados de la energía. Esta propiedad permite obtener resultados muy significativos estadísticamente y estudiar las diferencias entre regiones muy diferentes del espectro.

Además de estas tres características, hoy en día los billares son también muy importantes porque se pueden estudiar experimentalmente con cierta facilidad. Por un lado, la tecnología actual permite la construcción de dispositivos cuánticos mediante estructuras mesoscópicas que se comportan como billares en muy buena aproximación; los pozos, puntos y corrales cuánticos son tres buenos ejemplos de lo que la tecnología actual permite construir. Por otro lado, la ecuación de ondas en dos dimensiones es formalmente idéntica a la ecuación de Schrödinger estacionaria, de forma que los modos normales de los sistemas ondulatorios planos son equivalentes a los niveles de energía de los billares cuánticos en dos dimensiones; los experimentos de propagación de ondas en sólidos y líquidos, y los llamados billares de microondas sirven en consecuencia para estudiar experimentalmente la estadística espectral de los billares cuánticos [32].

En esta sección vamos a estudiar las fluctuaciones espectrales de un billar regular y un billar caótico, utilizando tanto simulaciones numéricas como datos experimentales. Ambos billares se describen matemáticamente mediante la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$H\Psi = E\Psi, \quad (4.22)$$

donde H es el hamiltoniano de una partícula libre

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad (4.23)$$

y la función de onda Ψ es nula en la frontera y en el exterior del billar. Por lo tanto, la única diferencia entre unos billares y otros es la forma de la frontera, que determina si la dinámica del análogo clásico es regular o caótica, así como la dificultad técnica a la hora de resolver la ecuación de Schrödinger.

4.4.1. Billar integrable

Existen varios billares que satisfacen la condición de integrabilidad, tanto en dos como en tres dimensiones. En esta sección vamos a trabajar con un billar rectangular en dos dimensiones, que es uno de los más estudiados por su simplicidad; en [22], por ejemplo, se utilizó como caso genérico de sistema integrable.

Cálculo del espectro

Si se considera que $\hbar^2/2m = 1$, los niveles de energía para un billar de lados a y b son

$$E(n_x, n_y) = \pi^2 \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} \right), \quad (4.24)$$

donde n_x y n_y son números enteros positivos. Esta fórmula permite calcular un número cualquiera de niveles consecutivos en cualquier región del espectro, de modo que sus propiedades estadísticas pueden calcularse con gran fiabilidad.

Método de reescalado

Al igual que el cálculo del espectro, el reescalado se puede hacer analíticamente gracias a la serie de Weyl [26].

$$\overline{N}(E) = \frac{ab}{4\pi}E - \frac{(a+b)}{2\pi}E^{1/2} + \frac{1}{4}. \quad (4.25)$$

En este trabajo hemos aplicado esta ecuación sin ajustar ningún parámetro libre.

Aproximación semiclásica

La gran ventaja de los billares cuánticos con respecto a los sistemas estudiados con anterioridad es que tienen un análogo clásico sencillo; en particular, la geometría del billar rectangular permite calcular explícitamente las magnitudes semiclásicas que contribuyen al espectro cuántico. En este sistema, las órbitas periódicas están determinadas por el número de rebotes¹⁸ (n_a, n_b) sobre cada uno de los lados a y b ; cada par (n_a, n_b) codifica una familia de órbitas periódicas de la misma longitud y periodo¹⁹

$$l_{(a,b)} = 2\sqrt{(an_a)^2 + (bn_b)^2}, \quad (4.27)$$

$$\tau_{(a,b)}(E) = \frac{1}{2}l_{(a,b)}E^{-1/2}. \quad (4.28)$$

El conocimiento de las órbitas periódicas permite calcular las escalas fundamentales en el espectro de energías. Considérese la fórmula de Gutzwiller para la densidad a una determinada energía E

$$\tilde{g}(E) = 2 \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} A_{p,r}(E) \cos \left[\frac{rS_p(E)}{\hbar} + \nu_{p,r} \right]. \quad (4.29)$$

¹⁸Salvo que se especifique lo contrario, en todo momento se consideran solamente órbitas (n_a, n_b) primitivas, es decir, aquellas que no se pueden obtener a partir de otras más simples mediante repetición. Por ejemplo, la órbita $(n_a = 2, n_b = 4)$ no se considera porque se obtiene como repetición de la órbita $(n_a = 1, n_b = 2)$.

¹⁹Las expresiones que se presentan a continuación son clásicas. Para que la aproximación semiclásica (4.29) resulte dimensionalmente correcta, es necesario incluir factores \hbar que se obvian en (4.28); en particular, el periodo de cada órbita periódica se escribe

$$\tau_{(a,b)} = \frac{\hbar l_{(a,b)}}{2\sqrt{E}}. \quad (4.26)$$

Si se varía la energía una cantidad pequeña ΔE , todas las magnitudes clásicas pueden considerarse constantes [71]; sin embargo, el denominador \hbar produce que una pequeña variación de la acción $S_p(E)$ dé lugar a una variación importante en la fase de la ecuación anterior. Para calcular la magnitud de esta variación es suficiente una aproximación lineal

$$S_p(E + \Delta E) \sim S_p(E) + \frac{\partial S_p}{\partial E} \Delta E. \quad (4.30)$$

Teniendo en cuenta que $\partial S_p / \partial E = \tau_p$, donde τ_p es el periodo de la órbita periódica, el cambio de fase en la ecuación (4.29) es

$$\Delta\phi \sim \frac{r\tau_p}{\hbar} \Delta E. \quad (4.31)$$

A partir de este resultado, puede asignarse una escala de energía a cada órbita periódica tal que $\Delta\phi = 2\pi$

$$\Delta E = \frac{2\pi\hbar}{r\tau_p}, \quad (4.32)$$

donde r indica las repeticiones de las órbitas primitivas.

En el caso del billar rectangular, las fórmulas (4.28) permiten calcular explícitamente la escala de energía anterior

$$\Delta E_{(a,b)} = \frac{4\pi\sqrt{E}}{rL_{(a,b)}}. \quad (4.33)$$

Este resultado es el punto de partida para describir las fluctuaciones del espectro de energías a partir de las magnitudes semiclassicals. Para poder establecer una comparación con las escalas características de los estadísticos habituales, es necesario considerar el efecto del proceso de reescalado, que, en un billar en dos dimensiones, se reduce en primera aproximación a un cambio de escala según la ley de Weyl $\bar{\rho}(E) \sim A/4\pi$, donde A es el área del billar $A = ab$. De este modo, las escalas de energías reescaladas asociadas a cada órbita periódica son

$$\Delta\epsilon_{(a,b)} = \frac{A\sqrt{E}}{rl_{(a,b)}}. \quad (4.34)$$

En particular, la escala asociada a la órbita periódica más corta es

$$\Delta\epsilon_{max} = \frac{A\sqrt{E}}{l_{min}}. \quad (4.35)$$

A continuación veremos cómo la función δ_n aporta información relevante sobre estas escalas de energía.

Secuencia	α
1	1.92 ± 0.06
2	1.97 ± 0.05
3	1.99 ± 0.05
4	1.97 ± 0.07

Tabla 4.8: Valor del parámetro α para 4 secuencias de niveles de alta energía de un billar rectangular. El calculo se ha realizado ajustando por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$ el espectro de potencias medio de 200 espectros para cada caso.

Resultados a alta energía

La ecuación (4.35) indica la cota superior en la escala de las fluctuaciones espectrales; según se vio en el capítulo 2, es de esperar que alrededor de esa cota las fluctuaciones no sean universales. Para caracterizar la parte universal de las fluctuaciones de un billar rectangular resulta conveniente, en consecuencia, estudiar los niveles energéticos de alta energía, de forma que $\Delta\epsilon_{max} > N$, donde N es el número de niveles del espectro²⁰. A partir de (4.35) se obtiene inmediatamente una cota inferior para esa energía

$$E_{min} = \left(\frac{l_{min}N}{A} \right)^2. \quad (4.36)$$

El billar que estudiamos en esta tesis doctoral es de lados $a = \sqrt{\lambda}$ y $b = 1/\sqrt{\lambda}$, donde $\lambda = (\sqrt{5} - 1)/2$; de esta manera, se evitan las degeneraciones accidentales, al ser la razón $a/b = \lambda$ un número irracional, y, además, se cumple $A = 1$. Para este billar, la longitud de la órbita más corta es $l_{min} = 2\sqrt{\lambda}$, es decir, $l_{min} \sim 1.57$.

Para estudiar el espectro de potencias de la función δ_n hemos escogido 200 secuencias de $N = 10000$ niveles. Según el argumento anterior, la energía mínima para que $\Delta\epsilon_{max} > 10000$ es $E > 2.5 \cdot 10^8$, de modo que hemos seleccionado secuencias con $E > 10^9$.

En la figura 4.11 se muestra la función δ_n para cuatro secuencias de alta energía. Como era de esperar, los cuatro ejemplos son muy parecidos entre sí y al GDE.

En la figura 4.12 se muestra el espectro de potencias para los cuatro casos anteriores, promediado del mismo modo que los espectros individuales del ^{24}Mg y TBRE; en la tabla 4.8 se presentan los valores del parámetro α . En todos los casos se observa que la ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$ es una buena aproximación para todo el rango de frecuencias, con un exponente próximo a $\alpha = 2$.

Los resultados anteriores indican que la parte universal de las fluctuaciones de un billar rectangular está caracterizada por un exponente $\alpha = 2$; en ese sentido, los

²⁰Nótese que $\langle s \rangle = 1$ tras el proceso de reescalado, de forma que un espectro de N niveles abarca una escala de energía $\Delta\epsilon = N$.

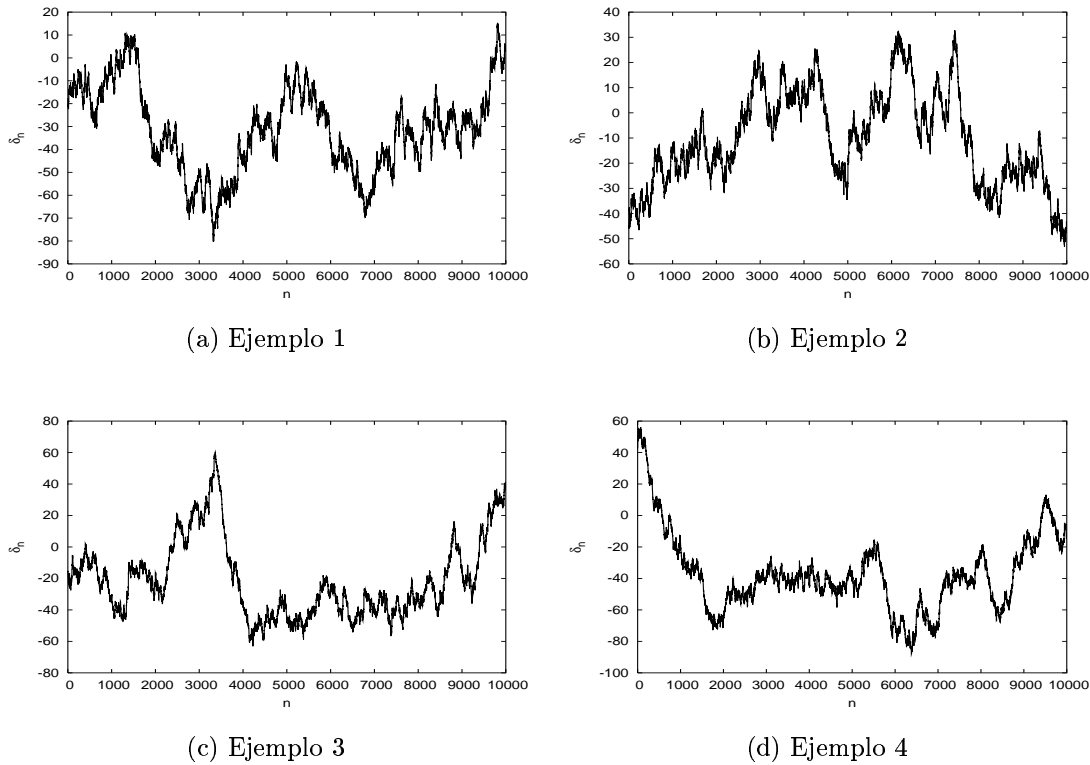


Figura 4.11: Función δ_n para cuatro secuencias correspondientes a un billar rectangular a energías $E > 10^9$.

resultados de la tabla 4.12 son bastante significativos, aunque se refieren a cuatro ejemplos escogidos al azar. Para obtener un resultado más concluyente es necesario realizar un promedio sobre algún tipo de colectividad, con el fin de caracterizar el billar de una manera global. En los casos estudiados en las secciones anteriores había una forma sencilla de realizar dicho promedio: promediando sobre diferentes realizaciones, en el caso de las matrices aleatorias, o promediando sobre diferentes momentos angulares, en el caso del núcleo atómico. El billar rectangular, por el contrario, se caracteriza por un conjunto infinito de niveles discretos, sin ninguna etiqueta que permita diferenciar unos de otros; además, el rango de energía de cada frecuencia determina sin ambigüedades una cota superior para la escala de las fluctuaciones, de forma que promediando sobre diferentes escalas se pierde parte de la información. Para solventar estas dificultades, en este trabajo hemos seleccionado 200 secuencias de alta energía en las que se cumple que $\Delta\epsilon_{max} > N$ en todas ellas; como es de esperar que las propiedades estadísticas de cada una de estas secuencias sean idénticas, podemos considerar que son 200 miembros de una misma

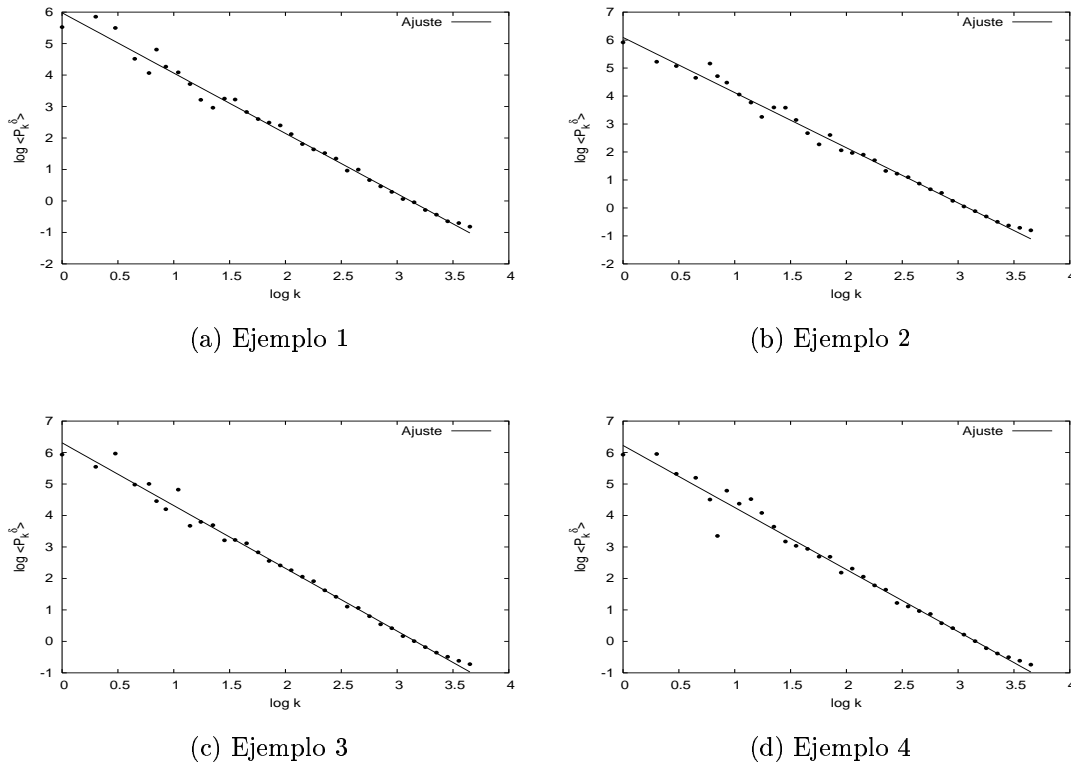


Figura 4.12: Espectro de potencias de la función δ_n para cuatro secuencias correspondientes a un billar rectangular a energías $E > 10^9$. Las líneas representan el ajuste por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$.

colectividad.

En la figura 4.13 representamos la probabilidad de obtener un valor α ajustando secuencias de niveles individuales según el procedimiento anterior. El resultado se describe bastante bien con una Gaussiana de parámetros (media y dispersión)

$$\begin{aligned}\mu &= 1.95 \\ \sigma &= 0.06.\end{aligned}$$

En la figura 4.14 se representa el espectro de potencias medio para las 200 secuencias consideradas. El ajuste por mínimos cuadrados se ha realizado sin considerar las frecuencias más altas, en las que se aprecia una desviación con respecto a la ley²¹ $P_\omega^\delta \propto \omega^{-\alpha}$; el resultado es:

$$\alpha = 1.988 \pm 0.002.$$

²¹En el capítulo 5 se explica el origen de estas desviaciones a alta frecuencia.

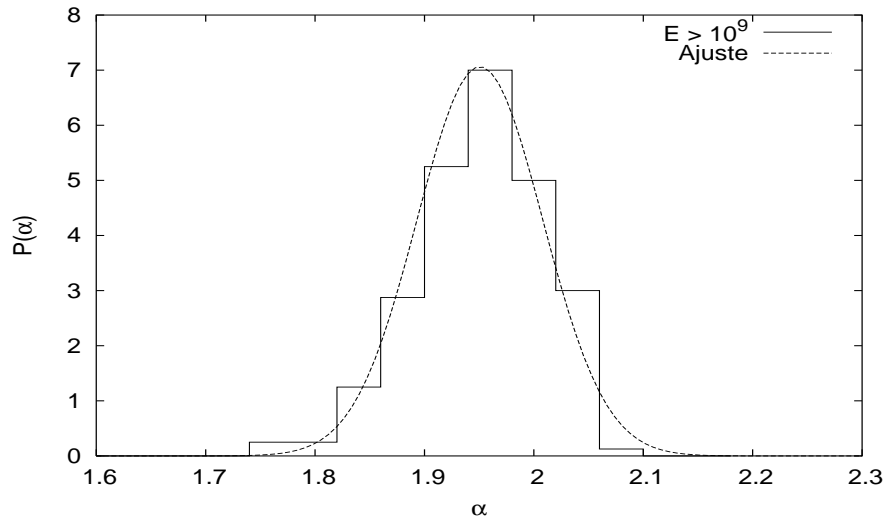


Figura 4.13: Probabilidad $P(\alpha)$ de obtener un valor determinado de α para 200 secuencias de alta energía en un billar rectangular. El histograma representa el resultado numérico y la línea discontinua la Gaussiana de parámetros más adecuados.

En la figura se aprecia con nitidez que no hay efectos anómalos a bajas frecuencias, tal y como era de esperar en el rango de energías que estamos considerando; esto confirma la suposición de que todas las secuencias son estadísticamente equivalentes²². Las desviaciones a alta frecuencia son idénticas a las observadas en el GDE y serán comentadas en detalle en el capítulo siguiente.

Resultados a baja energía

Además de para caracterizar la parte universal de las fluctuaciones, la función δ_n es muy útil también a la hora de estudiar los efectos anómalos debidos a las órbitas periódicas cortas. La escala de energía asociada a cada órbita (4.33) queda determinada también por una frecuencia

$$\omega_{(a,b)} = \frac{2\pi}{\Delta\epsilon_{(a,b)}} = \frac{2\pi r l_{(a,b)}}{A\sqrt{E}}, \quad (4.37)$$

de modo que la órbita más corta da lugar a una frecuencia mínima

$$\omega_{min} = \frac{2\pi l_{min}}{A\sqrt{E}}. \quad (4.38)$$

²²Como los efectos anómalos relacionados con las órbitas de periodo más corto dependen de la energía, su presencia indica que las distintas secuencias no pueden considerarse estadísticamente equivalentes, ya que en cada una de ellas los efectos anómalos son diferentes.

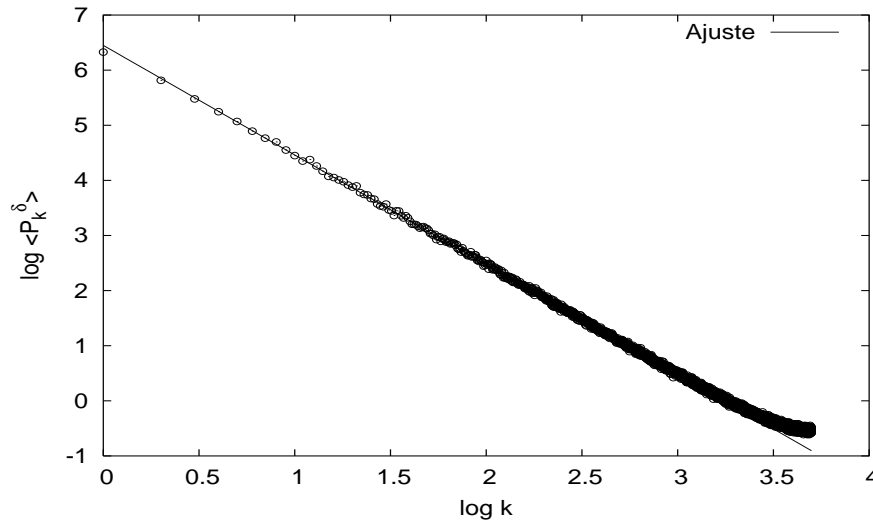


Figura 4.14: Espectro de potencias promedio para una colectividad de 200 secuencias de niveles de alta energía de un billar rectangular. La línea continua representa el ajuste por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$.

Si consideramos que $\langle \epsilon_n \rangle = n$, podemos suponer que dicha frecuencia, expresada en escala de energías reescaladas, coincide numéricamente con la correspondiente en la función δ_n , $\omega_k = 2\pi k/N$; el espectro de potencias ha de comportarse de forma no universal para $\omega \gtrsim \omega_{min}$.

Para estudiar los efectos anómalos a baja frecuencia en el billar rectangular hemos considerado secuencias de 256 niveles próximos al fundamental; no utilizamos secuencias mayores para evitar que el rango de energías de cada una de ellas sea demasiado grande. En la figura 4.15 se representa el espectro de potencias de la función δ_n para cuatro secuencias de baja energía, cada una etiquetada por la energía E_0 de su nivel central (aproximadamente); no realizamos ningún tipo de promedio porque en esta ocasión no estamos interesados en calcular el exponente α , sino en determinar los efectos anómalos característicos de cada espectro individual. Las frecuencias correspondientes a las dos órbitas de periodo más corto se marcan con una flecha; con el fin de distinguir los efectos anómalos a baja frecuencia, se representa también una línea correspondiente al ajuste del espectro medio de la colectividad a alta frecuencia.

En los cuatro casos representados en la figura 4.15 se observa con nitidez que el espectro de potencias queda por debajo de la ley²³ $P(\omega)^\delta = \omega^{-\alpha}$ para $\omega < \omega_{min}$, tal y como debe ocurrir según la teoría resumida en el capítulo 2. En las secuencias con $E_0 = 3000$ y $E_0 = 9000$, además, la resolución es suficiente para observar el

²³Recuérdese que no existen fluctuaciones con $\omega < \omega_{min}$, de modo que estas frecuencias no contribuyen al espectro de Fourier.

comportamiento del espectro de potencias entre las dos frecuencias correspondientes a las dos órbitas más cortas (hay varios puntos entre ambas), ω_1 y ω_2 . En estos casos se observa, también con nitidez, que la intensidad del espectro de potencias disminuye de forma apreciable en esta región, de nuevo tal y como sería de esperar debido a que no hay fluctuaciones con frecuencias comprendidas entre ω_1 y ω_2 .

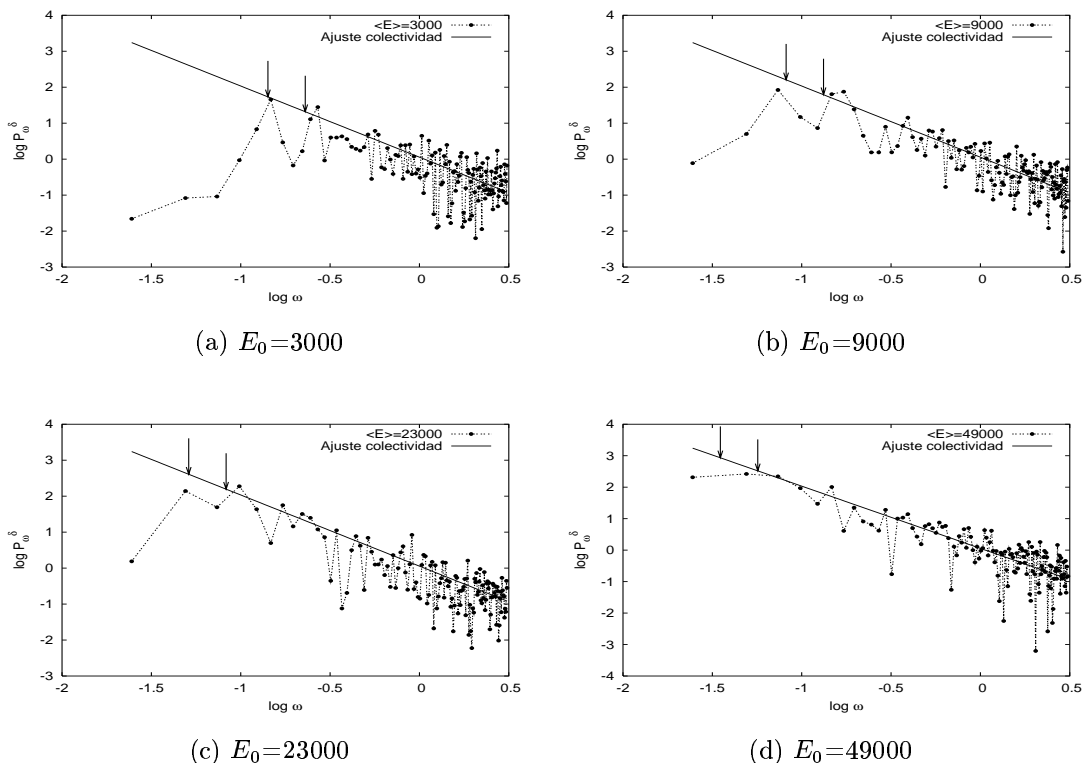


Figura 4.15: Espectro de potencias de la función δ_n para un billar rectangular a baja energía. Los puntos representan los valores numéricos; la línea continua el resultado del ajuste por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$; y las flechas indican las frecuencias correspondientes a las dos órbitas periódicas de periodo más corto.

Este último resultado permite concluir que la función δ_n es también muy útil a la hora de determinar las propiedades no universales características de cada sistema concreto.

4.4.2. Billares caóticos

En general, determinar si un sistema es o no caótico es una tarea muy complicada²⁴. Los billares, que clásicamente consisten en una partícula que rebota elásticamente en un contorno cerrado, constituyen uno de los pocos sistemas para los que existen resultados concretos sobre su integrabilidad; en particular, está demostrado que algunos casos como el billar de Sinai, el billar estadio de Bunimovich o el billar cardiode son ergódicos. Estos resultados han hecho que el billar caótico sea probablemente el sistema cuántico caótico más estudiado, tanto en experimento como de forma computacional. En esta sección abordamos el estudio de las fluctuaciones espectrales de un billar caótico modelado experimentalmente: el billar de Sinai.

Obtención del espectro

Los espectros utilizados en esta sección proceden de los experimentos de absorción de microondas en resonadores realizados por el grupo de H.-J. Stöckmann [72]. Estos experimentos se basan en la equivalencia entre la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y la ecuación de Helmholtz para modelar experimentalmente los billares cuánticos. En el caso bidimensional, la ecuación de Helmholtz se escribe

$$(\Delta + k^2) \Psi = 0, \quad (4.39)$$

donde k es la frecuencia de resonancia y las condiciones de contorno de los sistemas cuánticos y electromagnéticos son equivalentes [73]. La medición de las autofrecuencias k_i que verifican la ecuación anterior se realiza mediante antenas dispuestas en diversos puntos del resonador; a partir de ellas se puede obtener el espectro $\{E_i\}$ del billar cuántico correspondiente aplicando la relación de dispersión cuántica

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.40)$$

Este tipo de experimentos proporcionan secuencias de niveles lo bastante largas para estudiar sus fluctuaciones de manera significativa. No obstante, el dispositivo experimental es incapaz de detectar algunas autofrecuencias debido a: a) el poder de resolución máximo del dispositivo, que impide resolver autofrecuencias muy próximas; b) la imposibilidad de detectar los modos cuyos nodos coincidan con la posición de la(s) antena(s). Cuando esto sucede, la aplicación de la ley de Weyl para el cálculo de $\bar{\rho}(E)$ permite detectar los huecos resultantes en el espectro, de modo que es posible averiguar si dos niveles medidos son realmente consecutivos o si hay algún otro entre ambos.

El lector interesado en los detalles técnicos del experimento puede dirigirse a [72, 73, 74].

²⁴Recuérdese que estamos considerando *caótico* como sinónimo de *ergódico*, lo cual dificulta mucho más esta tarea.

Método de reescalado

El reescalado de todos los espectros puede hacerse de forma sencilla mediante la ley de Weyl (4.25), igual que con cualquier otro billar calculado de forma numérica o experimental. Sin embargo, en los casos que se tratan en esta sección, esta ley no es suficiente para reescalar correctamente el espectro de cara al estudio estadístico de sus fluctuaciones. En muchos billares caóticos, como el estadio, el Sinai o el rectangular con centros dispersores, existe una familia de órbitas periódicas marginalmente estables que rebotan entre los segmentos rectilíneos del billar, denominadas órbitas BBO²⁵. Desde el punto de vista clásico, la existencia de estas órbitas no deshace el carácter ergódico del sistema, ya que su peso relativo en el espacio de fases es nulo; pero en mecánica cuántica su influencia en el espectro es grande. Para extraer la contribución de estas órbitas BBO en el espectro es necesario añadir un nuevo término a $\bar{N}(E)$ por cada BBO

$$N^{BBO}(k) = \frac{L}{\pi} \sum_{0 < n < kl/\pi} \sqrt{k^2 - \frac{n^2\pi^2}{l^2}}, \quad (4.41)$$

donde k es la frecuencia $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, l la mitad de la longitud de la órbita BBO y L la longitud del lado perpendicular a la órbita BBO [75]. De esta manera

$$\bar{E} = N^{Weyl}(E) + \sum_{BBO} N^{BBO}(E). \quad (4.42)$$

En los casos que estudiamos en esta sección, las dos únicas BBO a considerar son las paralelas a los lados rectilíneos del billar.

Función δ_n y espectro de potencias

En general, una vez reescalado el espectro, el cálculo de la función δ_n y de su espectro de potencias es trivial. Sin embargo, en los casos que se estudian en esta sección, cada espectro adolece de algunos huecos correspondientes a los niveles no detectables, de forma que los niveles disponibles son $\{\epsilon_{p_1}, \epsilon_{p_2}, \dots, \epsilon_{p_i}, \dots, \epsilon_{p_M}\}$, donde M es el número de niveles cuya energía es conocida y $\{p_1, p_2, \dots, p_M\}$ son sus posiciones en el espectro. En esta situación, la función δ_n sólo puede calcularse para ciertos valores de n

$$\delta_{n_j} = \epsilon_{p_{j+1}} - \epsilon_{p_1} - n_j, \quad n_j = p_{j+1} - p_1, \quad j \in [0, \dots, M-1], \quad (4.43)$$

donde ϵ_{p_1} se ha tomado como estado fundamental; dicha función es, pues, como una serie temporal muestreada irregularmente.

²⁵Estas siglas proceden del inglés *Bouncing Ball Orbits*, que podría traducirse como *órbitas que rebotan*.

El cálculo de la transformada de Fourier de una serie muestreada irregularmente puede abordarse de forma muy parecida a la habitual. La transformada de Fourier discreta se puede escribir

$$\hat{\delta}_\omega = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} \delta_n \exp(-i\omega n) \quad (4.44)$$

para valores de $\omega_k = 2\pi k/N$, donde N es la longitud de la serie y $k = 1, 2, \dots, N$. De este modo, la señal transformada $\hat{\delta}_\omega$ se compone de N puntos, al igual que la señal original, aunque solamente la mitad de ellos son independientes; la otra mitad está relacionada con la primera mediante la conjugación compleja (véase apéndice B para más detalles). Esta última propiedad hace que al calcular el espectro de potencias la mitad de los puntos sea irrelevante, de modo que sólo se consideran las frecuencias $k = 1, 2, \dots, N/2$, lo que produce que la frecuencia máxima, conocida como frecuencia de Nyquist, sea $\omega = \pi$. Así pues, la transformación de Fourier puede considerarse como una descomposición de la señal en ondas sinusoidales de diferente periodo, de manera que el mayor de todos ellos, $\omega_1 = 2\pi/N$, corresponde a una sinusoidal de periodo igual a N , mientras que la frecuencia máxima corresponde a una sinusoidal de periodo doble al intervalo de muestreo.

En el caso de una señal muestreada irregularmente, estas definiciones pueden generalizarse considerando una definición alternativa de la transformada de Fourier según

$$\hat{\delta}(\omega) \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{j=0}^{M-1} \delta_{n_j} \exp(-i\omega n_j), \quad (4.45)$$

donde, en principio, la frecuencia ω no está especificada y el subíndice n_j no tiene por qué corresponder a un muestreo regular. Para que la descomposición en sinusoides sea lo más parecida posible a la correspondiente a una transformada de Fourier habitual, la frecuencia fundamental puede definirse sin ambigüedades como la correspondiente a una senoide de periodo igual a la distancia entre el primer y el último dato. La frecuencia mínima, por el contrario, no puede generalizarse de una manera sencilla, ya que no hay un intervalo de muestreo único; la frecuencia de Nyquist no está correctamente definida en este tipo de señales. Para solventar esta dificultad, en esta tesis doctoral hemos procedido de la siguiente manera:

- Hemos considerado una ventana $\mathcal{N} \leq N$ y hemos seleccionado todos los casos en los cuales existe al menos un par (p_a, p_b) tal que $\mathcal{N} = p_b - p_a$, con $p_1 \leq p_a \leq p_b \leq p_M$.
- Hemos calculado la transformada de Fourier en un conjunto de \mathcal{N} frecuencias $\omega_k = \frac{2\pi k}{\mathcal{N}}$, con $k = 1, \dots, \mathcal{N}/2$. De este modo, la frecuencia mínima es una

onda de periodo igual al tamaño de la ventana \mathcal{N} y la frecuencia máxima es $\omega = \pi$. Como el muestreo es irregular, es de esperar alguna anomalía en el entorno de la frecuencia máxima.

Resultados

El experimento se realiza sobre un billar de Sinai como el que se representa en la figura 4.16, de longitud variable entre $l = 480$ mm y $l = 460$ mm, anchura $b = 200$ mm y radio $r = 70$ mm. Los datos experimentales consisten en 100 secuencias de diferente l de unos 120 niveles cada una, en un rango de frecuencias entre 14.5 y 15.5 Ghz.

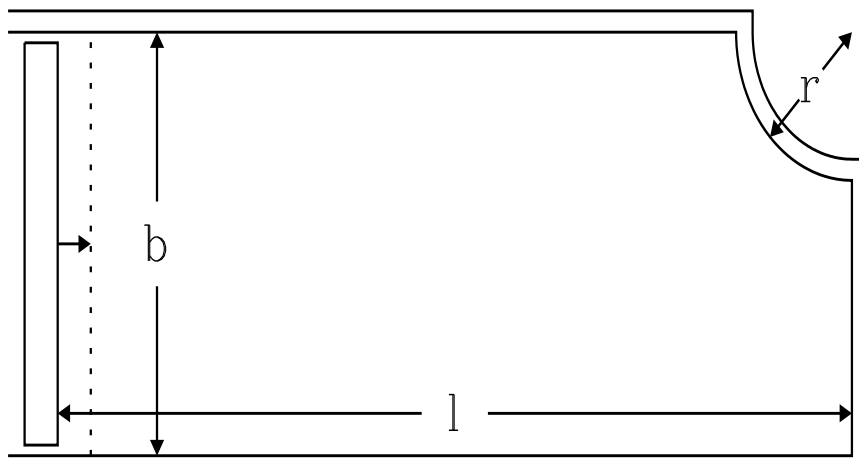


Figura 4.16: Esquema del billar de Sinai utilizado en el experimento.

Para analizar las fluctuaciones espectrales según el procedimiento que se acaba de describir, hemos seleccionado una ventana $\mathcal{N} = 85$, ya que es lo bastante grande para obtener resultados significativos y en casi todas las secuencias es posible encontrar p_a y p_b tales que $p_b - p_a = 85$. En la figura 4.17 se representa la función δ_n para cuatro secuencias con diferente valor de l . Las cuatro subfiguras muestran que los valores de n_j son diferentes para cada secuencia; lo único que no varía de una otra es el tamaño de la ventana.

El espectro de potencias se muestra en la figura 4.18. El promedio se ha realizado sobre las 97 secuencias para las que existe una ventana de tamaño $\mathcal{N} = 85$; las fluctuaciones con respecto a la tendencia media son más grandes que en los otros sistemas estudiados porque las secuencias no pueden considerarse estrictamente independientes²⁶. Las flechas indican las frecuencias ω_1 y ω_2 correspondientes a las

²⁶Una pequeña variación del parámetro l produce una variación pequeña en el espectro, debido,

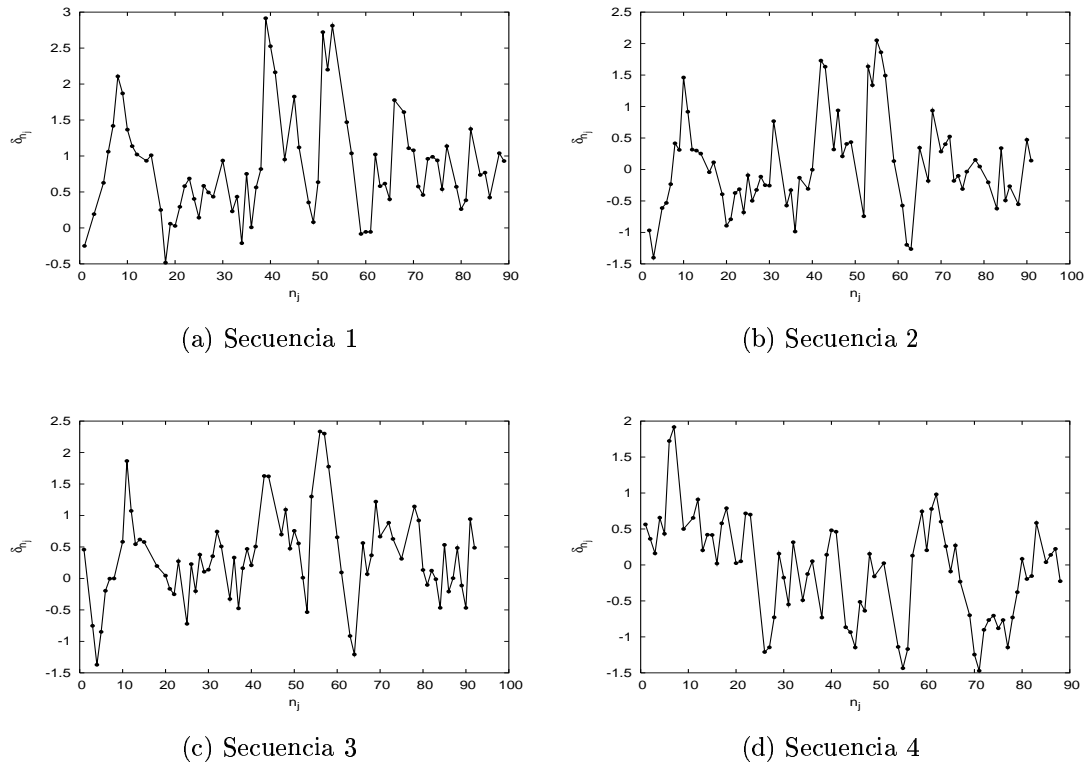


Figura 4.17: Función δ_n para distintas secuencias correspondientes al billar de Sinai experimental.

BBO eliminadas mediante el proceso de reescalado (que coinciden con las dos órbitas de periodo más corto); en la figura se aprecia que el espectro de potencias es menor que su valor esperado para frecuencias menores que ω_2 . Por último, la línea recta corresponde al ajuste por mínimos cuadrados eliminando las frecuencias más bajas y más altas; el resultado para el parámetros α es

$$\alpha = 1.0 \pm 0.1. \quad (4.46)$$

entre otras cosas, a la repulsión de niveles (véase [72]). En esta situación cabría preguntarse si es legítimo calcular un promedio sobre diferentes secuencias como si éstas fueran independientes, o si sería más adecuado realizar el promedio solamente sobre unas pocas secuencias con valores de l muy diferentes. En este trabajo hemos realizado el promedio sobre todas las secuencias porque es un proceso más sencillo de automatizar y, si bien no se consigue con él disminuir las fluctuaciones (el *musgo español*), tampoco se obtienen resultados espurios.

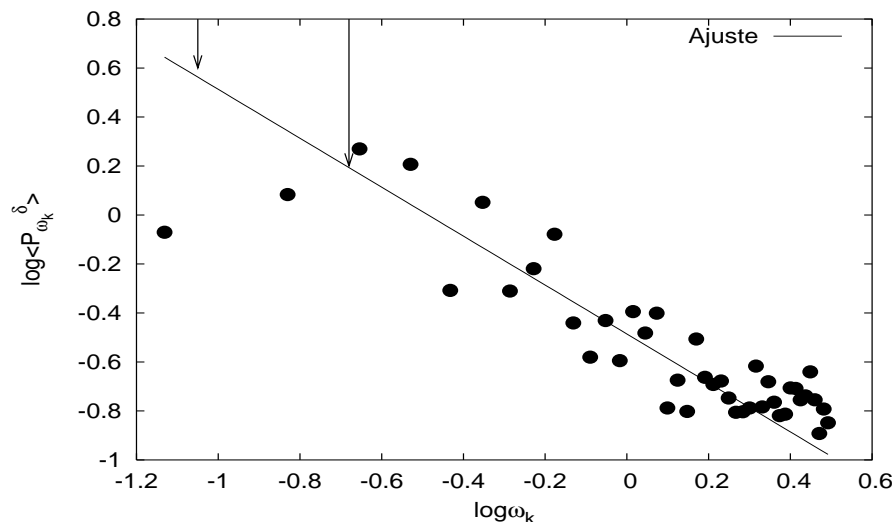


Figura 4.18: Espectro de potencias medio para el billar de Sinai experimental. La línea continua representa el ajuste por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$ y las flechas indican las frecuencias correspondientes a las dos órbitas periódicas de periodo más corto.

4.5. Conjetura

Los resultados de las secciones anteriores ponen claramente de manifiesto el diferente comportamiento del espectro de potencias de la función δ_n para sistemas cuánticos caóticos e integrables. En este capítulo se han utilizado cálculos y experimentos muy diferentes: desde modelos matemáticos (RMT), hasta sistemas hamiltonianos de muchos cuerpos (el núcleo atómico), pasando por sistemas más sencillos (los billares); en todos ellos se ha encontrado que el caos se manifiesta en forma de ruido $1/f$, en contraste con el ruido $1/f^2$ que caracteriza a los sistemas integrables. En [38] hemos expresado esta conclusión en forma de conjetura:

Las fluctuaciones del espectro de energías de los sistemas cuánticos caóticos constituyen un ruido $1/f$.

Esta conjetura es de gran interés porque permite caracterizar el caos cuántico de forma sencilla y con el lenguaje habitual en el estudio de fluctuaciones en sistemas complejos. Además, según la teoría sobre series temporales expuesta en el capítulo 3, la caracterización de las fluctuaciones espectrales mediante leyes de potencias $P(\omega) \propto \omega^{-\alpha}$ permite establecer una analogía entre la rigidez espectral, que caracteriza a los espectros cuánticos caóticos, y la antipersistencia, que es una propiedad estadística habitual en determinadas series temporales. Todos los resultados obtenidos hasta el momento indican que el caos en mecánica cuántica se manifiesta en

forma de serie fuertemente antipersistente, rozando el límite de antipersistencia²⁷.

²⁷Dado que la antipersistencia caracteriza a series con $1 < \alpha < 2$ podemos considerar que el caso $\alpha \sim 1$ como el límite de antipersistencia: un proceso físico que hiciera aumentar gradualmente la antipersistencia desde un movimiento browniano se detendría antes de llegar a $\alpha = 1$.

Capítulo 5

Teoría del ruido $1/f$ en caos cuántico

En el capítulo anterior se mostró que el espectro de energías de un sistema cuántico puede considerarse como una serie temporal y se conjeturó que el caos se manifiesta en mecánica cuántica como un ruido $1/f$ en las fluctuaciones de dicho espectro. La demostración rigurosa de esta conjetura se presenta demasiado complicada como para tratar de llevarla adelante en esta tesis doctoral¹, pero sí es posible comprobar su veracidad mediante aproximaciones muy razonables. En este capítulo se lleva a cabo una deducción teórica de la citada conjetura a partir de resultados ya conocidos de la teoría de matrices aleatorias, y se establecen las condiciones en las que el resultado puede explicarse a partir de mecánica semiclásica. Un resumen de estos resultados se encuentra publicado en [76].

Los cálculos y resultados que conforman en este capítulo son mucho más farragosos que los del resto de la tesis doctoral; el estilo y el lenguaje utilizados son, en consecuencia, más abstrusos. Con el fin de facilitar la lectura, el texto se organiza de la siguiente manera: una primera sección en la que se introduce la notación y la terminología utilizada; una segunda sección en la que se realiza un cálculo sencillo aplicable tan sólo a sistemas integrables; y una tercera sección en la que se realiza el cálculo completo, cuyos resultados son aplicables a sistemas tanto caóticos como regulares.

5.1. Notación y definiciones básicas

Dada la gran diversidad de funciones que aparecen a lo largo de todo el capítulo, presentamos aquí de forma clara la notación y la terminología que vamos a utilizar. Aunque en algunos casos puede haber pequeñas diferencias con respecto al resto de la tesis, creemos que esta pequeña contradicción es preferible a utilizar una notación

¹De hecho, todos los cálculos teóricos en caos cuántico se basan, bien en aproximaciones, como la mecánica semiclásica, bien en modelos matemáticos, como la teoría de matrices aleatorias.

demasiado abstrusa a lo largo de toda la memoria.

5.1.1. Notación general

Sea una función f con imagen real. Si su dominio de definición es el conjunto de los números enteros \mathbb{Z} , denotaremos su valor en un punto cualquiera $q \in \mathbb{Z}$ como f_q ; si su dominio es la recta real \mathbb{R} o uno o varios de sus intervalos, denotaremos su valor en $x \in \mathbb{R}$ de manera habitual: $f(x)$. Para toda función real $f(x)$, llamamos f_q , $q \in \mathbb{Z}$, a una función f idéntica a $f(x)$ definida sobre \mathbb{Z} o sobre un parte de él.

Sea $f(x)$ una función real definida al menos en el intervalo $[0, L]$. A partir de ella definimos una nueva función $f_L(x)$ de soporte compacto según

$$f_L(x) = \begin{cases} 0, & x \notin [0, L] \\ f(x), & x \in [0, L]. \end{cases} \quad (5.1)$$

Sea una función real $f(x)$ (o $f_L(x)$; no distinguiremos entre las dos en este momento) separable en una parte suave y una parte fluctuante². Denotaremos $\overline{f(x)}$ a la parte suave y $\widetilde{f(x)}$ a dicha parte fluctuante.

Sea $f(x)$ una función real de módulo integrable. Denotaremos por $\widehat{f}(\tau)$ a su transformada de Fourier, donde τ es la conjugada de Fourier de la variable x ; su espectro de potencias se denotará $P^f(\tau)$. En el caso de una función f_q definida sobre \mathbb{Z} , denotaremos su transformada de Fourier \widehat{f}_k y su espectro de potencias P_k^f , donde $k \in \mathbb{Z}$ es el índice correspondiente a la frecuencia discreta $\omega_k = 2\pi k/L$.

5.1.2. Notación y definiciones en caos cuántico

En este capítulo, la notación y los conceptos de nivel energético E_i , nivel reescalado ϵ_i y espaciamiento s_i son los mismos que en los capítulos anteriores. La función δ_n será denotada en general utilizando el subíndice q , para evitar errores de interpretación relacionados con ciertas cantidades que se definirán a continuación

$$\delta_q = \sum_{i=1}^q s_i - q = \epsilon_{q+1} - \epsilon_1 - q, \quad q \in \{0, \dots, N-1\}. \quad (5.2)$$

²En general, esta separación es un poco arbitraria. Entendemos aquí que la separación es posible si $f(x)$ se puede descomponer en una parte monótona o con un periodo de fluctuación del orden del tamaño de su dominio de definición, y en una parte que fluctúa en torno a la parte monótona.

La transformada de Fourier de esta función se define

$$\begin{aligned}\widehat{\delta}_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q=0}^{N-1} \delta_q e^{-\frac{2\pi i k q}{N}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q=1}^{N-1} \delta_q e^{-\frac{2\pi i k q}{N}}, \quad k \in \mathbb{Z}\end{aligned}\tag{5.3}$$

donde se ha utilizado que $\delta_0 = 0$. Con esta notación, la transformada inversa es

$$\delta_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \widehat{\delta}_k e^{\frac{2\pi i k q}{N}}, \quad q \in \{0, \dots, N-1\}.\tag{5.4}$$

La transformada de Fourier de una función discreta posee ciertas simetrías que determinan el conjunto de frecuencias k que aportan información relevante:

$$\widehat{\delta}_{k+pN} = \widehat{\delta}_k\tag{5.5}$$

$$\widehat{\delta}_{pN-k} = \widehat{\delta}_k^*,\tag{5.6}$$

donde $k, p \in \mathbb{Z}$. Estas dos propiedades implican que $\widehat{\delta}_k$ sólo es independiente en el intervalo $k \in [0, N)$; el valor de la función para frecuencias fuera de dicho intervalo se puede calcular a partir del valor de la función en él³.

Según la definición de la transformada de Fourier, el espectro de potencias $|\widehat{\delta}_k|^2$ de δ_q está bien definido para el mismo conjunto de frecuencias $k \in \{0, \dots, N-1\}$. Sin embargo, las propiedades de simetría que se acaban de describir implican que

$$|\widehat{\delta}_{k+pN}|^2 = |\widehat{\delta}_{pN-k}|^2 = |\widehat{\delta}_k|^2;\tag{5.7}$$

por este motivo, el espectro de potencias se calcula sólo para el conjunto de frecuencias $k \in \{0, \dots, N/2\}$, donde $k = N/2$ se conoce como *frecuencia de Nyquist*. En este capítulo utilizaremos la siguiente notación para el espectro de frecuencias:

$$P_k^\delta = |\widehat{\delta}_k|^2, \quad k \in \{0, \dots, N/2\}.\tag{5.8}$$

En general, la magnitud de interés no es el espectro de potencias de una función, sino su promedio \overline{P}_k^δ ⁴:

$$\overline{P}_k^\delta = \frac{1}{N} \sum_{p,q=1}^{N-1} \overline{\delta_p \delta_q} e^{-\frac{2\pi i k (p-q)}{N}}, \quad k \in \{0, \dots, N/2\}.\tag{5.9}$$

³El intervalo $k \in [0, N)$ se elige por comodidad. En algunas ocasiones se toma en su lugar $k \in [-N/2, N/2)$.

⁴Esta notación para el promedio es idéntica a la que utilizamos para denotar la parte suave de una función. En general, y dado que en este capítulo los promedios se van a realizar sobre las colectividades RMT, promedio y parte suave coinciden.

De aquí en adelante vamos consideraremos que la densidad de estados de cualquier hamiltoniano (físico o correspondiente a RMT) puede separarse en una parte suave y una parte fluctuante⁵. Además, nos restringiremos en general a un intervalo finito de niveles $[0, L]$, de modo que denotaremos la densidad de estados

$$\rho_L(\epsilon) = \bar{\rho}_L(\epsilon) + \tilde{\rho}_L(\epsilon) = 1 + \tilde{\rho}_L(\epsilon), \quad (5.10)$$

para lo que se ha tenido en cuenta que en el espectro reescalado $\{\epsilon_i\}$ se cumple $\langle s \rangle = 1$. Igualmente, supondremos también que la densidad acumulada de niveles puede descomponerse en una parte suave y en otra fluctuante, que denotaremos

$$n_L(\epsilon) = \bar{n}_L(\epsilon) + \tilde{n}_L(\epsilon), \quad (5.11)$$

donde, según las propiedades del espectro reescalado

$$\bar{n}_L(\epsilon) = \begin{cases} 0, & \epsilon \notin [0, L] \\ \epsilon & \epsilon \in [0, L], \end{cases} \quad (5.12)$$

y

$$\tilde{n}_L(\epsilon) = \begin{cases} 0, & \epsilon \notin [0, L] \\ \int_0^\epsilon \tilde{\rho}(\eta) d\eta & \epsilon \in [0, L]. \end{cases} \quad (5.13)$$

En todos los estudios numéricos realizados en el capítulo anterior hemos tratado la parte fluctuante de la densidad acumulada de estados $\tilde{n}_L(\epsilon)$ como un proceso estocástico discreto. La teoría semiclásica esbozada en el capítulo 2 establece, sin embargo, que $\tilde{n}_L(\epsilon)$ es una suma de cosenos, de modo que su forma real es suave y acotada en el intervalo $[0, L]$; es por lo tanto posible considerar que $\tilde{\rho}_L(\epsilon) = d\tilde{n}_L(\epsilon)/d\epsilon$. Esta última identidad será de gran utilidad en los cálculos que desarrollaremos a lo largo de las siguientes secciones.

Las transformadas de Fourier de $\tilde{\rho}_L(\epsilon)$ y $\tilde{n}_L(\epsilon)$ se definen según

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_L(\tau) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\rho}_L(\epsilon) e^{-2\pi i \epsilon \tau} d\epsilon = \int_0^L \tilde{\rho}(\epsilon) e^{-2\pi i \epsilon \tau} d\epsilon, \\ \hat{n}_L(\tau) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{n}_L(\epsilon) e^{-2\pi i \epsilon \tau} d\epsilon = \int_0^L \tilde{n}_L(\epsilon) e^{-2\pi i \epsilon \tau} d\epsilon, \end{aligned} \quad (5.14)$$

de modo que sus transformadas inversas son

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_L(\epsilon) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\rho}_L(\tau) e^{2\pi i \epsilon \tau} d\tau, \\ \tilde{n}_L(\epsilon) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{n}_L(\tau) e^{2\pi i \epsilon \tau} d\tau. \end{aligned} \quad (5.15)$$

⁵Esta suposición es consecuente con la teoría de matrices aleatorias y con la física semiclásica, tal y como se explicó en el capítulo 2.

No definimos las transformadas de Fourier de las partes suaves porque no son de interés para los cálculos que vamos a realizar a continuación.

A partir de las definiciones anteriores para las transformadas de Fourier, el espectro de potencias de la función $\tilde{n}_L(\epsilon)$ se define (véase el apéndice B):

$$P^{\tilde{n}_L}(\tau) = \frac{|\hat{n}_L(\tau)|^2}{L}; \quad (5.16)$$

el factor $1/L$ se introduce para garantizar la convergencia en el límite $L \rightarrow \infty$. Introduciendo la definición (5.15) en la ecuación anterior, el promedio del espectro de potencias se puede calcular

$$\begin{aligned} \overline{P^{\tilde{n}_L}(\tau)} &= \frac{1}{L} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \overline{\tilde{n}_L(\epsilon)\tilde{n}_L(\eta)} e^{-2\pi i(\epsilon - \eta)\tau} \\ &= \frac{1}{L} \int_0^L d\epsilon \int_0^L d\eta \overline{\tilde{n}_L(\epsilon)\tilde{n}_L(\eta)} e^{-2\pi i(\epsilon - \eta)\tau}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Por último, consideremos la función \tilde{n}_{Lq} , obtenida muestreando $\tilde{n}_L(\epsilon)$ para valores enteros de la energía reescalada $\epsilon = q \in \mathbb{Z}$; esta función constituye un punto de apoyo importante para calcular el espectro de potencias de la función δ_q a partir de $\overline{P^{\tilde{n}_L}(\tau)}$. La transformada de Fourier de \tilde{n}_{Lq} es

$$\begin{aligned} \hat{n}_{Lk} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q=0}^{N-1} \tilde{n}_L(q) e^{-\frac{2\pi ikq}{N}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q=1}^{N-1} \tilde{n}_L(q) e^{-\frac{2\pi ikq}{N}}, \quad k \in \{0, \dots, N-1\}, \end{aligned} \quad (5.18)$$

donde se ha tenido en cuenta que $\tilde{n}_L(0) = 0$. La función original \tilde{n}_{Lq} puede recobrase mediante la transformada inversa

$$\tilde{n}_{Lq} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{n}_{Lk} e^{\frac{2\pi ikq}{N}} \quad q \in \{0, \dots, N-1\}. \quad (5.19)$$

A partir de las definiciones anteriores, el espectro de potencias de \tilde{n}_{Lq} es

$$\begin{aligned} P_k^{\tilde{n}_L} &= |\hat{n}_{Lk}|^2 \\ &= \frac{1}{N} \sum_{p,q=1}^{N-1} \overline{\tilde{n}_L(p)\tilde{n}_L(q)} e^{-\frac{2\pi ik(p-q)}{N}}, \quad k \in \{0, \dots, N/2\}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

En la tabla 5.1 se presenta un resumen de la notación introducida en esta sección.

Dominio	\mathbb{R}	\mathbb{Z}	
Función	$\tilde{n}(\epsilon)$	\tilde{n}_q	δ_q
Transformada de Fourier	$\hat{n}(\tau)$	\hat{n}_k	$\hat{\delta}_k$
Espectro de potencias	$P^n(\tau)$	P_k^n	P_k^δ

Tabla 5.1: Resumen de la notación empleada

5.2. Cálculo para un sistema integrable

En la siguiente sección desarrollaremos un método de cálculo general, aplicable tanto a sistemas caóticos como a sistemas integrables; en ambos casos el cálculo de P_k^δ se puede abordar a partir de $\tilde{n}_L(\epsilon)$. En el caso de los sistemas integrables, sin embargo, es posible realizar el mismo cálculo de una forma mucho más sencilla, considerando que la secuencia de espaciamentos $\{s_i\}$ es una secuencia de variables aleatorias independientes; a partir de aquí, es posible trabajar directamente con la función δ_q , sin sin hacer referencia a la continua $\tilde{n}_L(\epsilon)$.

Considérese la fluctuación del i -ésimo espaciamento $w_i = s_i - \langle s \rangle$. Como cada uno de los espaciamentos es una variable aleatoria independientes, la secuencia $\{w_i\}$ es también una secuencia de variables aleatorias independientes, de modo que la función $\delta_q = \sum_{i=1}^q w_i$ puede considerarse una suma de variables aleatorias independientes de media nula. Si expresamos la variable w_i a partir de su transformada de Fourier \hat{w}_k , la función δ_q se escribe

$$\delta_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{w}_k \sum_{m=1}^q e^{\frac{2\pi i k m}{N}}, \quad q \in \{0, \dots, N-1\}. \quad (5.21)$$

Esta ecuación es muy similar a (5.4), que expresa δ_q en función de su transformada de Fourier $\hat{\delta}_k$. Para profundizar en el parecido, sumamos a continuación el último término de la ecuación anterior

$$\sum_{m=1}^q e^{\frac{2\pi i k m}{N}} = -i \frac{e^{\frac{\pi i k}{N}} \left[e^{\frac{2\pi i k q}{N}} - 1 \right]}{2 \sin\left(\frac{\pi k}{N}\right)}, \quad k \in \{0, \dots, N-1\}. \quad (5.22)$$

A partir de este resultado⁶, δ_q se escribe

$$\delta_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_{k=0}^{N-1} -i \frac{\hat{w}_k e^{\frac{i\pi k}{N}}}{2 \sin\left(\frac{\pi k}{N}\right)} e^{\frac{2\pi i k q}{N}} + \sum_{k=0}^{N-1} i \frac{\hat{w}_k e^{\frac{i\pi k}{N}}}{2 \sin\left(\frac{\pi k}{N}\right)} \right]. \quad (5.23)$$

⁶Obsérvese que si $q = N$, la suma es nula, de forma que $\delta_N = \delta_0 = 0$.

El primero de los dos sumandos de la ecuación anterior tiene la forma de una transformada de Fourier inversa; según él, la transformada de Fourier de δ_q sería

$$\widehat{\delta}_k = -i \frac{\widehat{w}_k e^{\frac{i\pi k}{N}}}{2 \sin\left(\frac{\pi k}{N}\right)}, \quad k \in \{0, \dots, N-1\}. \quad (5.24)$$

Este resultado es de gran importancia, pues a partir de él sería posible obtener el espectro de potencias de forma trivial simplemente calculando el módulo al cuadrado de (5.24). Para poder aplicarlo, no obstante, es necesario evaluar el segundo sumando de (5.23), ya que sólo si este término es nulo la expresión anterior para $\widehat{\delta}_k$ es correcta. La forma más sencilla de llevar a cabo la suma es desarrollando la exponencial en senos y cosenos, de modo que

$$\sum_{k=0}^{N-1} \frac{i\widehat{w}_k e^{-i\pi k/N}}{2 \sin\left(\frac{\pi k}{N}\right)} = \sum_k \frac{i\widehat{w}_k}{2 \tan\left(\frac{\pi k}{N}\right)} - \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{2} \widehat{w}_k. \quad (5.25)$$

El cálculo de esta suma requiere conocer con cierto detalle las propiedades de \widehat{w}_k . En el caso que nos ocupa, al ser $\{w_i\}$ una secuencia de variables aleatorias independientes de media nula, se cumple que $\langle \widehat{w}_k \rangle = 0$, de forma que el segundo de los sumandos puede considerarse nulo (siempre que $N \gg 1$). Para evaluar el primer sumando, hay que considerar que el argumento de la tangente recorre uniformemente el intervalo $(0, \pi)$, de forma que la serie $\{\widehat{w}_k\}$ se suma con un peso simétrico con respecto a $k = N/2$; podemos suponer, por lo tanto, que

$$\sum_{k=0}^{N-1} \frac{i\widehat{w}_k}{2 \tan\left(\frac{\pi k}{N}\right)} \approx 0, \quad (5.26)$$

siempre y cuando la longitud N de la serie sea suficientemente grande para que $\tan\left(\frac{\pi k}{N}\right)$ varíe suavemente con k .

Una vez evaluados estos dos sumandos, el cálculo del espectro de potencias a partir de (5.24) es trivial

$$P_k^\delta = \frac{|w_k|^2}{4 \sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right)}, \quad k \in \{0, \dots, N/2\}, \quad N \gg 1. \quad (5.27)$$

Por último, la caracterización de los sistemas integrables de forma genérica requiere calcular el valor medio $\overline{P_k^\delta}$. El único punto complicado en este cálculo es el término $\overline{|w_k|^2}$, que es el que determina la amplitud de las fluctuaciones. La manera más sencilla de abordar el cálculo es considerar que $|\widehat{w}_k|^2 = \widehat{w}_k \widehat{w}_k^*$, de modo que, escribiendo \widehat{w}_k como transformada de Fourier

$$|\widehat{w}_k|^2 = \frac{1}{N} \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{N-1} w_q w_p e^{\frac{2\pi i k}{N}(p-q)}, \quad (5.28)$$

el término $\overline{|w_k|^2}$ se escribe

$$\overline{|\widehat{w}_k|^2} = \frac{1}{N} \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{N-1} \overline{w_p w_q} e^{\frac{2\pi i k}{N}(p-q)}. \quad (5.29)$$

Como la secuencia $\{w_i\}$ está considerada de variables aleatorias independientes, la correlación $\overline{w_p w_q}$ es trivial

$$\overline{w_p w_q} = \begin{cases} \overline{w_p^2}, & q = p \\ 0 & q \neq p, \end{cases} \quad (5.30)$$

de modo que

$$\overline{|\widehat{w}_k|^2} = \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{N-1} \frac{\overline{w_p^2}}{N} \delta_{pq} e^{\frac{2\pi i k}{N}(p-q)} = \sum_{p=0}^{N-1} \frac{\overline{w_p^2}}{N}. \quad (5.31)$$

Por último, el término $\overline{w_p^2}$ se obtiene de manera trivial considerando que la secuencia de espaciamentos sigue una distribución de Poisson

$$\overline{w_p^2} = \int_0^\infty ds (s-1)^2 e^{-s} = 1, \quad (5.32)$$

de forma que

$$\overline{P_k^\delta} = \frac{1}{4 \sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right)}. \quad (5.33)$$

Los experimentos numéricos presentados en el capítulo 4 nos permitieron concluir que las fluctuaciones espectrales de los sistemas integrables constituyen un ruido $1/f^2$, al menos para frecuencias medias y bajas. El cálculo que acabamos de realizar permite corroborar este resultado desarrollando la expresión (5.33) en serie de Taylor hasta primer orden en la frecuencia k :

$$\overline{P_k^\delta} = \frac{N^2}{4\pi^2 k^2}, \quad k \ll N. \quad (5.34)$$

A continuación comprobamos numéricamente la validez del resultado teórico (5.33) y de su aproximación a una ley de potencias (5.34).

5.2.1. Resultados

En la figura 5.1 se representa el espectro de potencias medio para la colectividad GDE (el mismo que se representó en la figura 4.3), junto con la curva teórica (5.33); en la parte superior derecha se adjunta un panel en el que se muestra ampliada la misma figura para frecuencias altas, con el fin de observar mejor cómo la curva

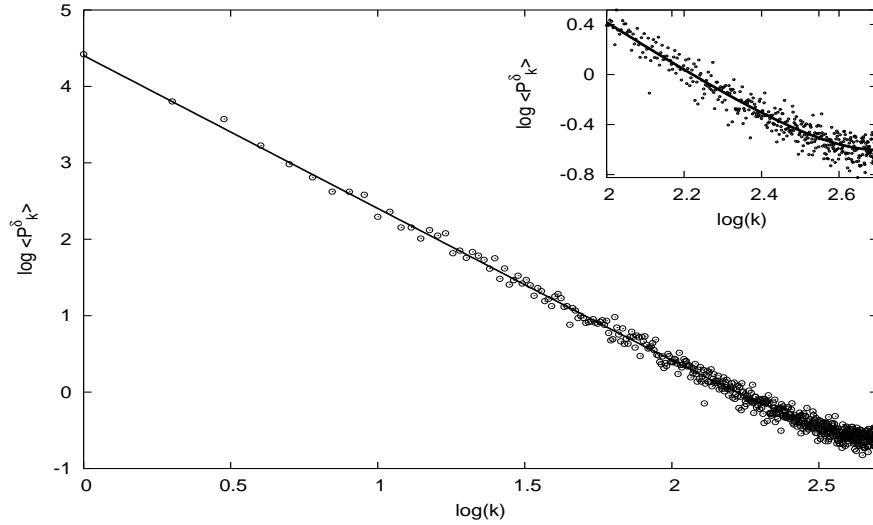


Figura 5.1: Comparación entre los resultados teórico y numérico para el espectro de potencias medio de la colectividad GDE, calculado utilizando 30 matrices de dimensión $N = 1000$. El panel superior muestra una ampliación de la zona de altas frecuencias.

teórica describe con precisión la curvatura a alta frecuencia. El acuerdo entre el cálculo teórico y el cálculo numérico es extraordinario.

Con el fin de comprobar el resultado teórico en un ejemplo físico, en la figura 5.2 se representa el espectro de potencias medio para 200 secuencias de un billar rectangular a alta energía, junto con la curva teórica (5.33) y la aproximación a una ley de potencias (5.34). En este caso, las curvas teóricas que se han dibujado no se corresponden exactamente con las anteriores, sino que se ha ajustado un parámetro libre $A = \overline{w_p^2}$, de modo que

$$\overline{P_k^\delta} = \frac{A}{4 \sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right)}; \quad (5.35)$$

hemos procedido de este modo porque en muchas ocasiones el segundo momento de la secuencia de espaciamentos no coincide exactamente con el valor teórico (en este caso concreto $\overline{w_p^2} \approx 1.15$). En la figura se aprecia con claridad que la curva teórica (5.35) reproduce con exactitud el espectro de potencias en todo el rango de frecuencias, tanto la parte lineal como las desviaciones a alta frecuencia. La aproximación a una ley de potencias, por el contrario, sólo describe correctamente el comportamiento lineal; no obstante, en la figura también se aprecia con claridad que es una muy buena aproximación al menos a lo largo de tres órdenes de magnitud del contador k .

Estos resultados ponen de manifiesto que el cálculo realizado sirve para describir con precisión los sistemas regulares, aunque en ocasiones es necesario introducir un

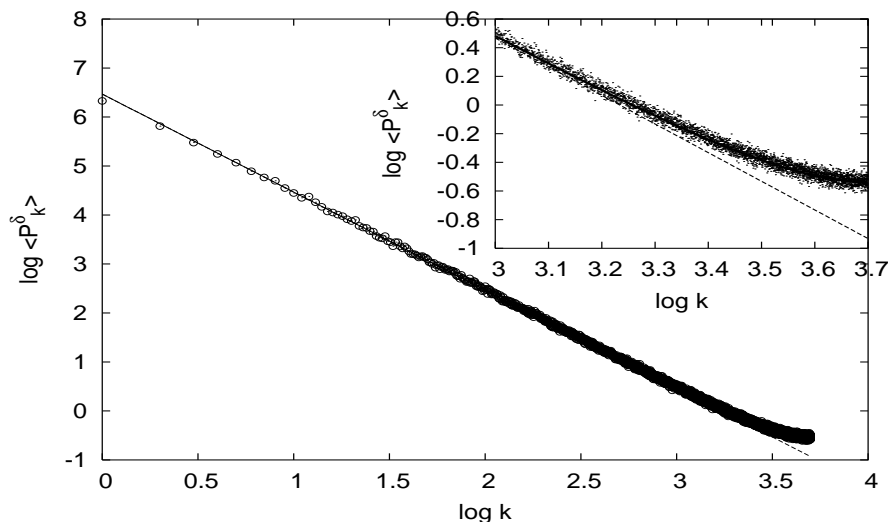


Figura 5.2: Comparación entre los resultados teórico y numérico para el espectro de potencias medio de un billar rectangular a alta energía, calculado utilizando 200 secuencias de dimensión $N = 10000$. El panel superior muestra una ampliación de la zona de altas frecuencias.

pequeño factor de corrección con respecto a la ecuación (5.33).

5.3. Cálculo para un sistema caótico

El cálculo de P_k^δ para un sistema caótico no puede abordarse de forma tan sencilla como en el caso de un sistema integrable: las correlaciones entre espaciamentos, características del caos, impiden (o al menos dificultan sobremanera) el cálculo directo a partir de la función δ_q . En esta sección llevamos a cabo el cálculo de P_k^δ para un sistema caótico a partir de resultados ya conocidos de la teoría de matrices aleatorias, que, según se explicó en los primeros capítulos, describe con precisión la parte universal de las fluctuaciones espectrales de los sistemas caóticos.

El procedimiento para obtener la función P_k^δ a partir de la teoría de matrices aleatorias es bastante laborioso; por esa razón, dividimos el proceso en tres apartados: cálculo de $\overline{P^n(\tau)}$, cálculo de $\overline{P_k^n}$ y cálculo de $\overline{P_k^\delta}$; al principio de cada uno de estos apartados comentaremos los objetivos concretos y las técnicas a utilizar. El cálculo se realiza precisamente en este orden porque a partir de $\overline{P^n(\tau)}$ se puede establecer un vínculo directo con resultados conocidos de la teoría de matrices aleatorias.

Como se dijo al principio de la sección anterior, este método también es aplicable a sistemas integrables, y da como resultado la ecuación (5.33). Comentaremos cómo aplicarlo a estos sistemas cuando sea necesario.

5.3.1. Cálculo de $\overline{P^{\tilde{n}_L}(\tau)}$

La forma más sencilla de obtener $\overline{P^{\tilde{n}_L}(\tau)}$ consiste en partir de resultados ya conocidos sobre la parte fluctuante de la densidad de estados. La función de correlación para esta magnitud se define

$$R_\rho(\epsilon_0, \epsilon) = \left\langle \tilde{\rho}\left(\epsilon_0 + \frac{\epsilon}{2}\right) \tilde{\rho}\left(\epsilon_0 - \frac{\epsilon}{2}\right) \right\rangle_{\epsilon_0}, \quad (5.36)$$

es decir, para un intervalo finito de energía $\Delta\epsilon_0$

$$R_\rho(\epsilon_0, \epsilon) = \frac{1}{\Delta\epsilon_0} \int_{\epsilon_0 - \frac{\Delta\epsilon_0}{2}}^{\epsilon_0 + \frac{\Delta\epsilon_0}{2}} dx \tilde{\rho}\left(x + \frac{\epsilon}{2}\right) \tilde{\rho}\left(x - \frac{\epsilon}{2}\right). \quad (5.37)$$

A partir de esta función de correlación se define el factor de forma

$$K(\epsilon_0, \tau) = \int d\epsilon R_\rho(\epsilon_0, \epsilon) e^{-2\pi i \tau \epsilon}, \quad (5.38)$$

donde la dependencia explícita en la energía ϵ_0 indica la energía media de la ventana en la cual se calcula la correlación⁷.

El factor de forma es conocido tanto para las principales colectividades de matrices aleatorias como para los sistemas caóticos e integrables genéricos en aproximación semiclásica; esta magnitud es, por lo tanto, un excelente punto de partida para el cálculo de $\overline{P^{\tilde{n}_L}(\tau)}$. El modo más directo de relacionar ambas cantidades es a partir del teorema de Wiener-Kinchin (véase capítulo 3), que, aplicado a este caso, establece que:

$$\lim_{\Delta\epsilon_0 \rightarrow \infty} K(\epsilon_0, \tau) = |\hat{\rho}(\tau)|^2, \quad (5.39)$$

donde

$$\hat{\rho}(\tau) = \lim_{L \rightarrow \infty} \hat{\rho}_L(\tau). \quad (5.40)$$

Si se considera que $\hat{\rho}_L(\epsilon) = d\hat{n}_L(\epsilon)/d\epsilon$ se puede escribir

$$\hat{\rho}_L(\epsilon) = \frac{d}{d\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \hat{n}_L(\tau) e^{2\pi i \epsilon \tau} = 2\pi i \tau \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \hat{n}_L(\tau) e^{2\pi i \epsilon \tau}, \quad (5.41)$$

utilizando el teorema de la diferenciación para transformadas de Fourier (véase apéndice B). De esta forma, según la definición de la transformada de Fourier inversa de $\hat{\rho}_L(\epsilon)$, es inmediato que

$$\hat{n}_L(\tau) = \frac{\hat{\rho}_L(\tau)}{2\pi i \tau}. \quad (5.42)$$

⁷En muchas ocasiones no se incluirá en la notación esta dependencia explícita en la energía ϵ_0 . Se entenderá entonces que las propiedades estadísticas del espectro no dependen de este parámetro.

Reuniendo todos estos resultados se obtiene

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \overline{P^{\tilde{n}_L}}(\tau) = \frac{K(\tau)}{4\pi^2\tau^2}, \quad (5.43)$$

de modo que podemos considerar sin gran error que⁸

$$\overline{P^{\tilde{n}_L}}(\tau) \sim \frac{K(\tau)}{4\pi^2\tau^2}, \quad L \gg 1. \quad (5.44)$$

5.3.2. Cálculo de $\overline{P_k^{\tilde{n}_s}}$ como aproximación a $\overline{P^{\tilde{n}_s}(\tau)}$ mediante muestreo

El siguiente paso en el cálculo de $\overline{P_k^{\tilde{n}_s}}$ consiste en discretizar (o muestrear) $\overline{P^{\tilde{n}_L}(\tau)}$ para valores $\tau_k = k/N$, donde $N = L$, y obtener así $\overline{P_k^{\tilde{n}_L}}$. En el apéndice B se muestra que la relación entre las transformadas de Fourier continua y discreta no es trivial: no es suficiente sustituir $\tau_k = k/N$, sino que hay que considerar una serie de términos adicionales, tal y como se muestra en la ecuación (B.28). Para $\hat{n}_L(\tau)$, el resultado es

$$\hat{n}_{Lk} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q \in \mathbb{Z}} \hat{n}_L(\tau_k + q) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q \in \mathbb{Z}} \hat{n}_L\left(\frac{k}{N} + q\right). \quad (5.45)$$

El espectro de potencias $\overline{P_k^{\tilde{n}_s}}$ puede calcularse a partir de la expresión anterior según

$$\begin{aligned} P_k^{\tilde{n}_s} &= |\hat{n}_{Lk}|^2 = \sum_{p,q=-\infty}^{\infty} \frac{\hat{n}_L^*\left(\frac{k}{N} + q\right) \hat{n}_L\left(\frac{k}{N} + q\right)}{N} \\ &= \sum_{q=-\infty}^{\infty} P^{\tilde{n}_L}\left(\frac{k}{N} + q\right) + \sum_{p \neq q=-\infty}^{\infty} \frac{\hat{n}_L^*\left(\frac{k}{N} + q\right) \hat{n}_L\left(\frac{k}{N} + q\right)}{N}, \end{aligned} \quad (5.46)$$

de modo que su valor medio es

$$\overline{P_k^{\tilde{n}_s}} = \sum_{q=-\infty}^{\infty} \overline{P^{\tilde{n}_L}\left(\frac{k}{N} + q\right)} + \sum_{p \neq q=-\infty}^{\infty} \frac{\overline{\hat{n}_L^*\left(\frac{k}{N} + q\right) \hat{n}_L\left(\frac{k}{N} + q\right)}}{N}. \quad (5.47)$$

⁸Rigurosamente este resultado sólo es válido para $\tau \neq 0$. Por otro lado, esta expresión sugiere por continuidad (más adelante se darán expresiones para el factor de forma $K(\tau)$) que $\overline{P^{\tilde{n}_L}(\tau)}$ diverge para $\tau = 0$; un cálculo detallado muestra que, efectivamente, $\overline{P^{\tilde{n}_L}(0)} \rightarrow \infty$ cuando $L \rightarrow \infty$. Las desviaciones para L finito pueden calcularse con ayuda de expresiones conocidas en RMT [37].

El primer sumado de esta ecuación se obtiene a partir de la ecuación (5.44) incluyendo el factor de forma exacto para cada una de las colectividades de matrices aleatorias. Para obtener el segundo hay que evaluar $\widehat{n}_L^*(\tau)\widehat{n}_L(\tau')/N$; la forma más sencilla de hacerlo es considerando que

$$\begin{aligned} \frac{\widehat{n}_L^*(\tau)\widehat{n}_L(\tau')}{L} &= \frac{1}{4\pi\tau\tau'} \frac{\overline{\widehat{\rho}_L^*(\tau)\widehat{\rho}_L(\tau')}}{L} \\ &= \int_0^L d\epsilon \int_0^L d\nu \overline{\widehat{\rho}(\epsilon)\widehat{\rho}(\nu)} e^{2\pi i\epsilon\tau} e^{-2\pi i\nu\tau'}. \end{aligned} \quad (5.48)$$

Para calcular esta integral es conveniente desarrollar $\overline{\widehat{\rho}(\epsilon)\widehat{\rho}(\nu)}$ en términos de la función $Y_2(x)$ (véase apéndice A), de modo que

$$\widehat{\rho}_L^*(\tau)\widehat{\rho}_L(\tau') = \int_0^L d\epsilon e^{2\pi i\epsilon(\tau - \tau')} - \int_0^L d\epsilon \int_0^L d\nu Y(\epsilon - \nu) e^{2\pi i\epsilon\tau} e^{-2\pi i\nu\tau'}, \quad (5.49)$$

El cálculo de esta última integral no es complicado, pero sí laborioso; no aporta ningún avance conceptual y requiere varios pasos intermedios muy técnicos. Para evitar una digresión demasiado amplia omitimos los detalles del cálculo y presentamos directamente el resultado

$$\frac{\widehat{n}_L^*(\tau)\widehat{n}_L(\tau')}{L} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \begin{cases} K(\tau) & \tau = \tau', \\ 0 & \tau \neq \tau', \end{cases} \quad (5.50)$$

donde $\tau, \tau' \neq 0$.

A partir de esta última expresión es inmediato que

$$\overline{P_k^{\widetilde{n}_s}} = \sum_{q=-\infty}^{\infty} \overline{P^{\widetilde{n}_L} \left(\frac{k}{N} + q \right)}, \quad k \in (1, 2, \dots, N/2), \quad (5.51)$$

donde se ha excluido $k = 0$ para evitar divergencias y para poder aplicar a esta expresión los resultados anteriores. Con el fin de facilitar los cálculos posteriores, es conveniente expresar esta última expresión como sigue:

$$\overline{P_k^{\widetilde{n}_L}} = \overline{P^{\widetilde{n}_L}(k/N)} + \sum_{q=1}^{\infty} \overline{P^{\widetilde{n}_L}(q + k/N)} + \sum_{q=1}^{\infty} \overline{P^{\widetilde{n}_L}(q - k/N)} \quad k \in \{1, \dots, N/2\}. \quad (5.52)$$

Para realizar el cálculo de los sumatorios involucrados en la expresión anterior es necesario suponer que para $N \gg 1$ y $\tau > 1$ la aproximación $\overline{P^{\widetilde{n}_s}(\tau)} \sim K_\beta(\tau)/(2\pi\tau)^2$ es buena. Esta aproximación permite realizar el cálculo de manera exacta para las colectividades GDE y GUE, gracias a que en ellas la expresión para el factor de

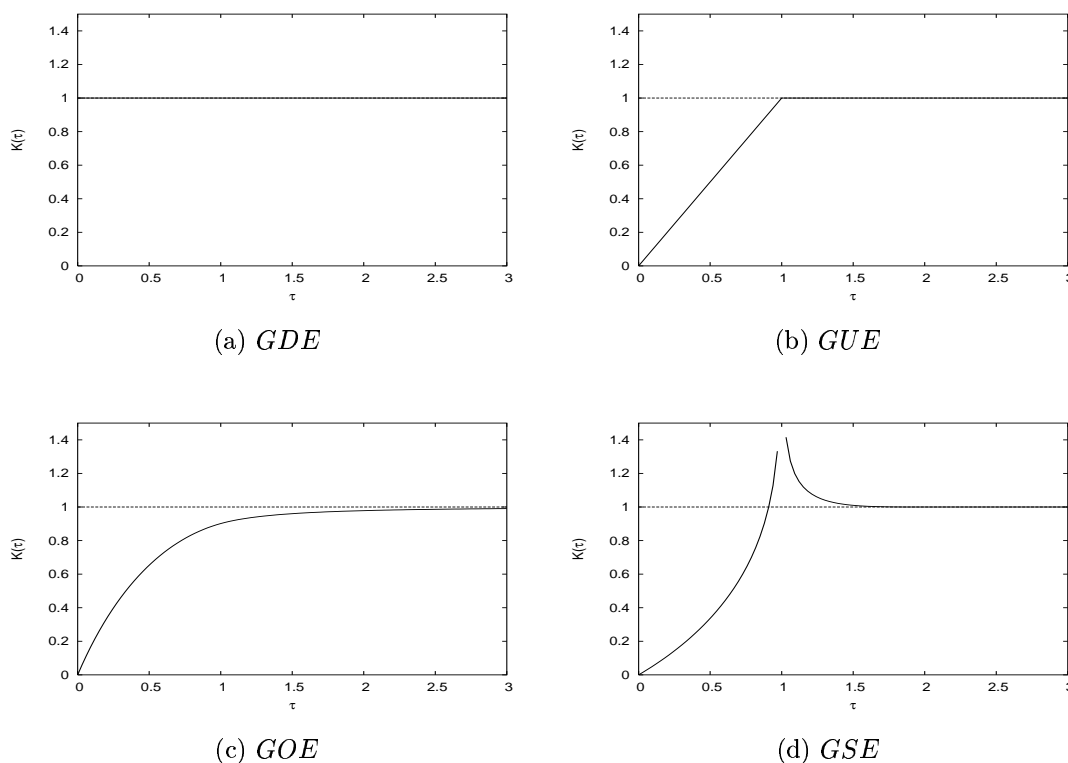


Figura 5.3: Factor de forma para GDE, GUE, GOE y GSE. En todos los casos se adjunta una línea discontinua en $K(\tau) = 1$.

forma es muy sencilla. Para realizar el cálculo correspondiente a las colectividades GOE y GSE hay que suponer, además, que para $N \gg 1$ y $\tau > 1$, $K_\beta(\tau) \simeq 1$.

En la figura 5.3 se representa el factor de forma para las cuatro colectividades estándar de RMT; en todos los casos se adjunta una línea discontinua en $K(\tau) = 1$ con el fin de contrastar la validez de la aproximación $K_\beta(\tau) \simeq 1$. En las colectividades GDE y GUE se observa que $K_\beta(\tau) = 1$ para $\tau \geq 1$; por esa razón, el cálculo anterior se puede realizar de forma exacta. Para la colectividad GOE, la figura muestra que la aproximación $K_1(\tau) \simeq 1$ es bastante buena; así pues, se puede postular que la expresión analítica para esta colectividad ha de reproducir los resultados numéricos con bastante exactitud. Por el contrario, en el caso de la colectividad GSE, la figura muestra que la validez de la aproximación $K_4(\tau) \simeq 1$ es cuestionable, debido a la divergencia que hay en $\tau = 1$; por esa razón, no cabe esperar que el cálculo para esta colectividad reproduzca los resultados numéricos con gran precisión.

La inclusión de las aproximaciones comentadas en la ecuación (5.52) da lugar a

$$\begin{aligned} \overline{P_k^{\tilde{n}_L}} &\sim \overline{P^{\tilde{n}_L}(k/N)} + \overline{P^{\tilde{n}_L}(1 - k/N)} \\ &+ \sum_{q=1}^{\infty} \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{\left(q + \frac{k}{N}\right)^2} + \sum_{q=2}^{\infty} \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{\left(q - \frac{k}{N}\right)^2}, \quad k \in \{1, \dots, N/2\}, \quad N \gg 1. \end{aligned} \quad (5.53)$$

Las dos series involucradas en este último resultado se pueden sumar analíticamente

$$\begin{aligned} \overline{P_k^{\tilde{n}_L}} &\sim \overline{P^{\tilde{n}_L}(k/N)} + \overline{P^{\tilde{n}_L}(1 - k/N)} \\ &+ \frac{\Psi' \left(1 + \frac{k}{N}\right)}{4\pi^2} + \frac{\Psi' \left(2 - \frac{k}{N}\right)}{4\pi^2}, \quad k \in \{0, \dots, N - 1\}, \quad N \gg 1, \end{aligned} \quad (5.54)$$

donde Ψ' es la derivada de la función digamma, que se define [77]

$$\Psi(z) = \frac{d}{dz} \log \Gamma(z), \quad (5.55)$$

donde $\Gamma(z)$ es la función gamma, que vale $\Gamma(n) = (n - 1)!$ si $n \in \mathbb{N}$ y

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} dt t^{z-1} e^{-t} \quad (5.56)$$

para $z \in \mathbb{R}$. La suma de los dos términos que involucran funciones digamma se pueden expresar de forma más sencilla teniendo en cuenta que

$$\frac{\Psi' \left(1 + \frac{k}{N}\right)}{4\pi^2} + \frac{\Psi' \left(2 - \frac{k}{N}\right)}{4\pi^2} = \frac{1}{4 \sin^2 \left(\frac{\pi k}{N}\right)} - \frac{N^2}{4\pi^2 k^2} - \frac{N^2}{4\pi^2 (N^2 - k^2)}, \quad (5.57)$$

de modo que

$$\begin{aligned} \overline{P_k^{\tilde{n}_L}} &\sim \overline{P^{\tilde{n}_L}(k/N)} + \overline{P^{\tilde{n}_L}(1 - k/N)} - \frac{N^2}{4\pi^2 k^2} - \frac{N^2}{4\pi^2 (N^2 - k^2)} + \frac{1}{4 \sin^2 \left(\frac{\pi k}{N}\right)}, \\ &k \in \{1, \dots, N/2\}, \quad N \gg 1. \end{aligned} \quad (5.58)$$

Este último resultado se puede escribir de forma más compacta en función del factor de forma $K(\tau)$

$$\overline{P_k^{\tilde{n}_L}} \sim \frac{N^2}{4\pi^2} \left[\frac{K_\beta(k/N) - 1}{k^2} + \frac{K_\beta(1 - k/N) - 1}{(N - k)^2} \right] + \frac{1}{4 \sin^2 \left(\frac{\pi k}{N}\right)}. \quad (5.59)$$

De esta manera es evidente que en los sistemas integrables, donde $K_{GDE} = 1$, el resultado es

$$\overline{P_k^{\tilde{n}_L}} \sim \frac{1}{4 \sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right)}. \quad (5.60)$$

5.3.3. Relación entre $\overline{P_k^{\tilde{n}}}$ y $\overline{P_k^\delta}$

El cálculo de $\overline{P_k^\delta}$ a partir de los resultados de la sección anterior puede parecer a primera vista trivial: la función δ_q mide la fluctuación del nivel reescalado ϵ_{q+1} con respecto a su valor medio. Sin embargo, un examen cuidadoso de las dos magnitudes involucradas muestra una diferencia importante entre ambas: en el caso de $\tilde{n}(\epsilon_{q+1})$, la variable independiente es la energía reescalada ϵ ; en δ_q , es el índice q el que juega ese papel. El proceso de reescalado tiene como consecuencia que $\overline{\epsilon_{q+1} - \epsilon_1} = q$, de modo que es razonable pensar que el cambio de variable ha de ser hasta cierto punto trivial; pero la realidad es que la relación entre $\tilde{n}(\epsilon_{q+1})$ y δ_q es un poco más complicada. En esta sección abordamos este cálculo de forma detallada.

El mejor punto de partida para el cálculo que queremos realizar es

$$\overline{\tilde{n}_s(q)^2 - \delta_q^2} = \begin{cases} 0 & \beta = 0, \\ \frac{1 - \delta(q, 0)}{6} & \beta > 1, 2, 4. \end{cases} \quad (5.61)$$

donde $\delta(q, 0)$ representa la delta de Kronecker. Esta expresión sólo se verifica de forma asintótica (es decir, para $q \rightarrow \infty$) en RMT, pero numéricamente se demuestra que es válida prácticamente para todo valor de q [78]. El objetivo de esta sección es generalizar esta expresión para la varianza a la forma más general del segundo momento $\overline{\tilde{n}_L(p)\tilde{n}_L(q) - \delta_p\delta_q}$, ya que a partir de esta última expresión el cálculo del espectro de potencias es trivial.

Considérense dos niveles reescalados ϵ y η tales que $\epsilon \geq \eta$. La magnitud $\tilde{n}_s(\epsilon) - \tilde{n}_s(\eta)$ mide la diferencia entre la distancia real entre los niveles ϵ y η con respecto a su valor medio $\overline{n}_s(\epsilon) - \overline{n}_s(\eta) = \epsilon - \eta$. En promedio, la distancia entre dos niveles cualesquiera no depende de su situación en el espectro (con respecto, por ejemplo, al estado fundamental), sino de la posición relativa entre ambos; puede afirmarse,

por lo tanto, que⁹

$$\begin{aligned}\overline{\tilde{n}_L(\epsilon) - \tilde{n}_L(\eta)} &= \overline{\tilde{n}_L(\epsilon - \eta)} = 0, \\ \overline{(\tilde{n}_L(\epsilon) - \tilde{n}_L(\eta))^2} &= \overline{\tilde{n}_L(\epsilon - \eta)^2}.\end{aligned}\tag{5.62}$$

Si se desarrolla el miembro de la izquierda de la segunda expresión y se considera que el mismo cálculo para $\epsilon \leq \eta$ da lugar a una expresión análoga, se obtiene la siguiente relación general

$$\overline{\tilde{n}_L(\epsilon)\tilde{n}_L(\eta)} = \frac{1}{2} \left[\overline{\tilde{n}_L(\epsilon)^2} + \overline{\tilde{n}_L(\eta)^2} - \overline{\tilde{n}_L(|\epsilon - \eta|^2)} \right].\tag{5.63}$$

El siguiente paso para alcanzar el objetivo propuesto consiste en obtener una relación análoga para δ_q , de forma que la comparación directa entre las dos expresiones dé lugar al resultado que estamos buscando. La forma más sencilla de cumplir este objetivo consiste en partir de la siguiente relación

$$\overline{(\delta_q - \delta_p)^2} = \overline{\delta_q^2} + \overline{\delta_p^2} - 2\overline{\delta_p\delta_q}, \quad p, q \geq 0,\tag{5.64}$$

que, tras una serie de manipulaciones algebraicas, da lugar a

$$\overline{\delta_p\delta_q} = \frac{1}{2} \left[\overline{\delta_q^2} + \overline{\delta_p^2} - \overline{\delta_{|q-p|^2}^2} \right], \quad q, p \geq 0.\tag{5.65}$$

La deducción de esta última ecuación a partir de (5.64) es laboriosa y abstrusa, pero no aporta ninguna información adicional ni se basa en ningún tipo de aproximación o suposición: sólo requiere manipulaciones algebraicas sobre la función δ_n y considerar que el segundo momento de la secuencia de espaciamentos $\{s_i\}$ puede escribirse en términos de la función $E(x, s)$, que determina la probabilidad de encontrar exactamente x niveles en un intervalo de longitud s [37] (véase apéndice A). Por esa razón, y para mantener la continuidad del texto, hemos decidido no incluir la citada deducción en el texto.

⁹Esto solamente es cierto a escalas en las que las fluctuaciones son universales. Considérese un sistema con análogo clásico bien definido y dos niveles ϵ y η , tales que $\eta > \epsilon$, de forma que la distancia entre ϵ y el estado fundamental E_0 es una determinada energía d , $\epsilon = E_0 + d$, y que la distancia entre ϵ y η , $\eta - \epsilon = \Delta$, es mayor que la escala de energía correspondiente a la órbita de periodo más corto E_{min} . Si se supone que el espectro discreto es infinito (como ocurre en un billar, por ejemplo), siempre es posible desplazar los niveles η y ϵ una cierta cantidad Δd , $\epsilon = E_0 + d + \Delta d$, tal que la distancia Δ sea menor que la escala de energía correspondiente a la órbita periódica más corta E_{min} . Este resultado pone de manifiesto que las correlaciones estadísticas entre dos niveles ϵ y η dependen en general de su posición en el espectro, ya que ésta determina si se encuentran o no en la zona de universalidad. De aquí en adelante supondremos que las escalas involucradas están en todo momento en el rango correspondiente a la parte universal de las fluctuaciones.

Una simple comparación muestra que la relación (5.65) es formalmente idéntica a (5.63). Si tomamos $\epsilon = q$ y $\eta = p$, restando (5.63) y (5.65) se obtiene

$$\overline{\tilde{n}_s(q)\tilde{n}_s(p) - \delta_q\delta_p} = \frac{1}{2} \left[\left(\overline{\tilde{n}_s(q)^2 - \delta_q^2} \right) + \left(\overline{\tilde{n}_s(p)^2 - \delta_p^2} \right) - \left(\overline{\tilde{n}_s(|q-p|)^2 - \delta_{|q-p|}^2} \right) \right]. \quad (5.66)$$

El miembro de la izquierda de esta última ecuación es precisamente el segundo momento en la forma necesaria para calcular el espectro de potencias. El miembro de la derecha involucra tres términos formalmente idénticos entre sí y a la ecuación (5.61), de modo que

$$\overline{\tilde{n}_L(p)\tilde{n}_s(q) - \delta_p\delta_q} = \begin{cases} 0 & \beta = 0, \\ \frac{1 + \delta(p,q) - \delta(p,0) - \delta(q,0)}{12} & \beta = 1, 2, 4, \end{cases} \quad (5.67)$$

donde, nuevamente, $\delta(p, q)$ representa la delta de Kronecker.

Este último resultado permite encontrar una relación entre $\overline{P_k^{\tilde{n}}}$ y $\overline{P_k^\delta}$ para sistemas caóticos de forma sencilla; para sistemas integrables es evidente que $\overline{P_k^{\tilde{n}}} = \overline{P_k^\delta}$. A partir de las ecuaciones 5.9 y 5.17 es inmediato que

$$\overline{P_k^{\tilde{n}_L}} - \overline{P_k^\delta} = \frac{1}{N} \sum_{p,q=1}^{N-1} \left[\frac{1 + \delta(p,q)}{12} \right] e^{-\frac{2\pi ik(p-q)}{N}}, \quad k \in \{1, \dots, N/2\}, \quad (5.68)$$

o, lo que es lo mismo

$$\overline{P_k^{\tilde{n}_L}} - \overline{P_k^\delta} = \frac{1}{12} \left(1 + \frac{1}{N} \sum_{p,q=1}^{N-1} e^{-\frac{2\pi ik(p-q)}{N}} \right) = \frac{1}{12} \left(\frac{N-1}{N} + \frac{|\mathcal{S}_k|^2}{N} \right), \quad (5.69)$$

donde $\mathcal{S}_k = \sum_{q=1}^{N-1} e^{-\frac{2\pi ikq}{N}}$.

El valor de \mathcal{S}_k puede obtenerse fácilmente, ya que constituye una serie geométrica

$$|\mathcal{S}_k|^2 = \begin{cases} (N-1)^2 & k = 0, \\ 1 & k \in \{1, N-1\}. \end{cases} \quad (5.70)$$

Gracias a este último resultado, es inmediato que la relación que buscamos es

$$\overline{P_k^{\tilde{n}_L}} - \overline{P_k^\delta} = \begin{cases} 0 & \beta = 0, \\ \frac{1}{12} & \beta = 1, 2, 4. \end{cases} \quad k \in \{1, \dots, N/2\}. \quad (5.71)$$

De este modo, la expresión final para el espectro de potencias de la función δ_q es

$$\overline{P}_k^\delta \sim \begin{cases} \frac{1}{4 \sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right)} & \beta = 0, \\ \frac{N^2}{4\pi^2} \left[\frac{K_\beta(k/N) - 1}{k^2} + \frac{K_\beta(1 - K/N)}{(N - k)^2} \right] + \frac{1}{4 \sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right)} - \frac{1}{12} & \beta = 1, 2, 4. \end{cases} \quad (5.72)$$

Para obtener el resultado explícito de \overline{P}_k^δ para cada una de las colectividades RMT hay que sustituir en la expresión anterior el valor de la función $K_\beta(\tau)$ para cada una de ellas. En la tabla 5.2 se adjuntan los factores de forma para cada una de las colectividades de matrices aleatorias.

	$ \tau \leq 1$	$ \tau \geq 1$
$K_0(\tau)$	1	1
$K_1(\tau)$	$2 \tau - \tau \ln(1 + 2 \tau)$	$1 - \tau \left(\frac{2 \tau + 1}{2 \tau - 1} \right)$
$K_2(\tau)$	$ \tau $	1
	$ \tau \leq 2$	$ \tau \geq 2$
$K_4(\tau)$	$\frac{1}{2} \tau + \frac{1}{4} \tau \log 1 - \tau $	1

Tabla 5.2: Factores de forma para las distintas colectividades de RMT.

Según las expresiones incluidas en la tabla 5.2 es evidente que la forma de \overline{P}_k^δ es en general muy complicada; a partir de ella no queda claro hasta qué punto la conjetura formulada en el capítulo 4 es correcta. No obstante, un simple desarrollo de Taylor muestra que las expresiones anteriores se reducen a

$$\overline{P}_k^\delta = \frac{N}{2\beta\pi^2 k}, \quad k \ll N, \quad N \gg 1, \quad (5.73)$$

para las tres colectividades caóticas de RMT, y a

$$\overline{P}_k^\delta = \frac{N^2}{4\pi^2 k^2}, \quad k \ll N, \quad N \gg 1, \quad (5.74)$$

para los espectros regulares. Estos dos resultados confirman que los sistemas caóticos están caracterizados por un ruido $1/f$, mientras que los sistemas integrables presentan un ruido $1/f^2$.

5.3.4. Resultados

Los resultados obtenidos en la sección anterior proporcionan expresiones analíticas cerradas para el espectro de potencias de la función δ_n para sistemas caóticos con cualquier tipo de simetría¹⁰. Sin embargo, alguna de las aproximaciones utilizadas en las secciones anteriores, como $N \gg 1$, provocan ciertas dudas sobre la aplicabilidad de los resultados obtenidos a casos prácticos; además, en los casos GOE y GSE el cálculo se ha realizado simplificando el factor de forma. Conviene, por lo tanto, corroborar estos resultados mediante la comparación con datos numéricos y experimentales.

Resultados para RMT

En primer lugar, comparamos los resultados teóricos con los numéricos para matrices GOE, GUE y GSE que se utilizaron en [38] para formular la conjetura expresada en el capítulo 4.

En la figura 5.4 se representan los espectros numéricos promedio para las colectividades GOE, GUE y GSE, obtenidos tras diagonalizar 30 matrices con $N = 1000$ para colectividad; los espectros teóricos (línea continua) calculados según los resultados de la sección anterior; y la aproximación a una ley de potencias (5.73) (línea discontinua).

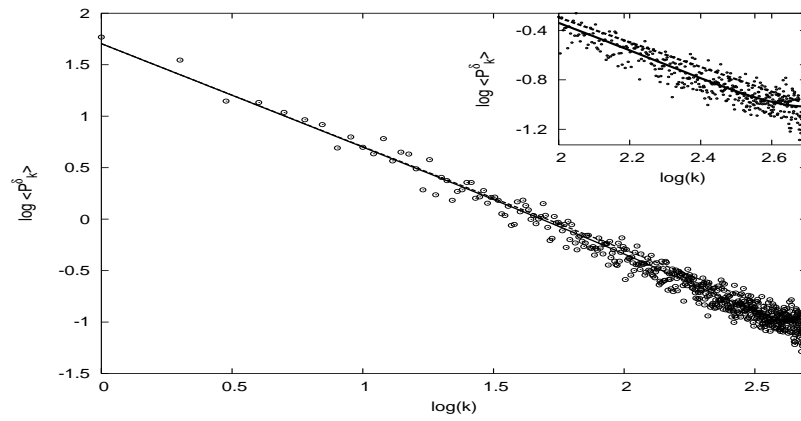
En el caso del GUE, la correspondencia entre el cálculo teórico y los resultados numéricos es extraordinaria: la curva teórica describe el resultado numérico en todo el rango de frecuencias; el panel superior, en el que se amplía la región de alta frecuencia, muestra con nitidez que la curva teórica describe con exactitud las desviaciones al comportamiento lineal que se observan en esta región. Además, la aproximación (5.73) resulta también bastante exacta, ya que sólo se observa una discrepancia con los datos numéricos para frecuencias próximas a la de Nyquist. Podemos concluir, en consecuencia, que la aproximación $N \gg 1$ (la única que se realiza en este caso) es aplicable a los espectros que se tratan habitualmente.

En el caso del GOE, también hay una coincidencia apreciable entre los resultados numéricos y el resultado teórico: apenas hay discrepancias importantes salvo a muy alta frecuencia, como se observa en el panel superior. En esta ocasión, sin embargo, la aproximación (5.73) no resulta tan adecuada, al menos para matrices de tamaño medio¹¹.

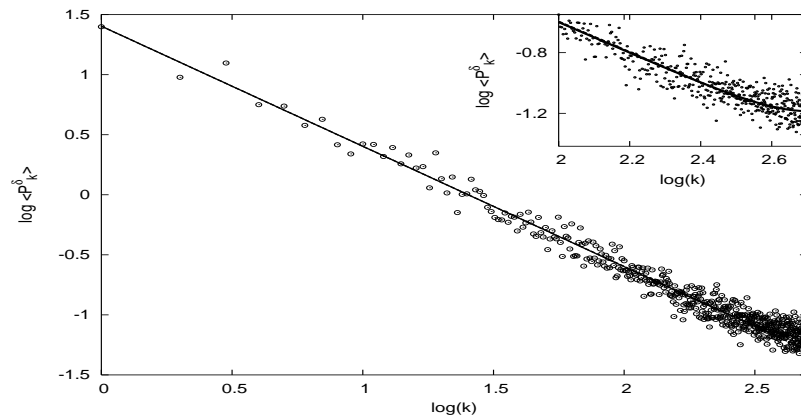
Por último, los resultados obtenidos para la colectividad GSE ponen de manifiesto que en este caso la aproximación $K_4(\tau) \sim 1$, $\tau \geq 1$ no es buena, debido a

¹⁰Como las expresiones para los sistemas integrables ya se contrastaron en la sección 5.2, a partir de ahora sólo nos dedicaremos a los sistemas caóticos.

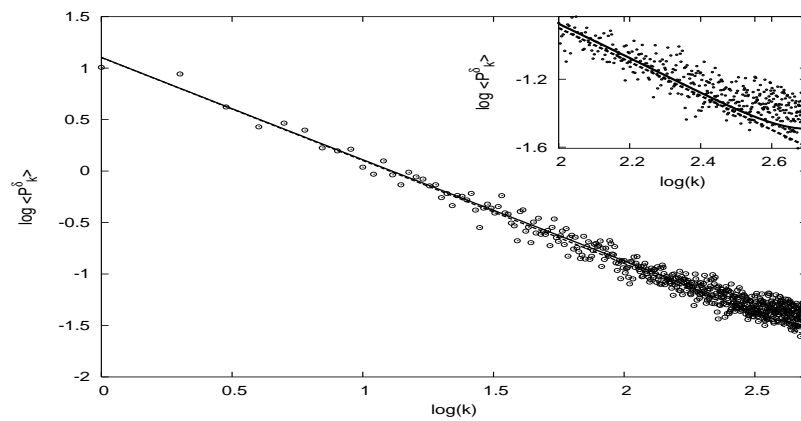
¹¹Recuérdese que los resultados numéricos dan un exponente $\alpha \approx 1.07$. Esta pequeña diferencia con $\alpha = 1$ pone de manifiesto que la aproximación (5.73) no funciona demasiado bien.



(a) GOE



(b) GUE



(c) GSE

Figura 5.4: Comparación entre los espectros teóricos y los numéricos para las colectividades GOE, GUE y GSE; la línea continua representa el resultado teórico exacto y la discontinua la aproximación a una ley de potencias (5.73). Los espectros numéricos se han calculado promediando sobre 30 matrices independientes. Los paneles superiores muestran una ampliación de la zona de altas frecuencias.

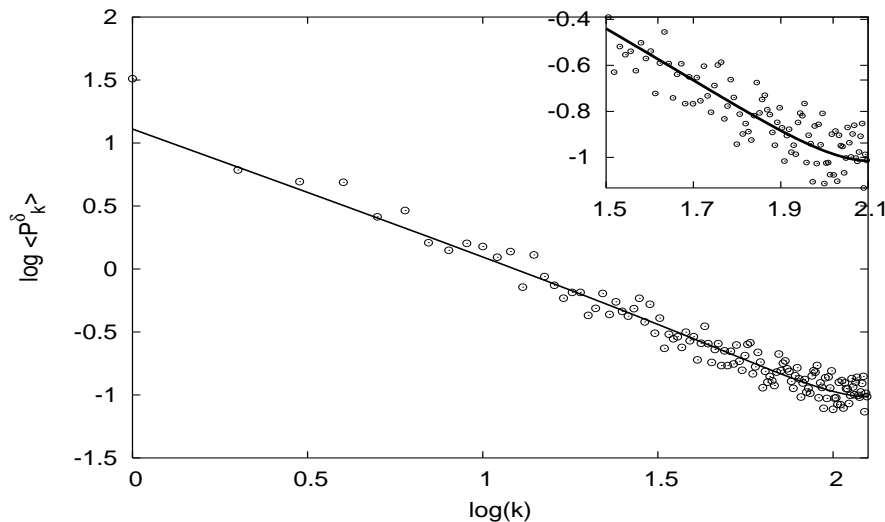


Figura 5.5: Comparación del espectro de potencias medio del ^{34}Na , calculado con 25 secuencias de $N = 256$ niveles, y la expresión teórica para un sistema GOE. El panel superior muestra una ampliación de la zona de altas frecuencias.

la divergencia que se observa en $\tau = 1$. En la figura se aprecia perfectamente que tanto la ley teórica exacta como la aproximación (5.73) se desvían bastante de los resultados numéricos, ambas en el mismo sentido; en el panel superior se observa perfectamente como ninguna de las dos curvas describe correctamente los resultados a alta frecuencia. La conclusión que se obtiene de este resultado es que el cálculo para la colectividad GSE tiene que abordarse de forma más rigurosa.

Resultados para sistemas físicos

Los resultados obtenidos con RMT avalan el cálculo teórico para sistemas con simetría GOE y GUE. No obstante, es conveniente también comparar dicho cálculo teórico con espectros procedentes de sistemas físicos.

En la figura 5.5 se muestra el espectro de potencias promedio para los niveles del espectro del ^{34}Na calculado con el mismo método que se utilizó para el ^{24}Mg en el capítulo 4; en este caso, la curva teórica se ha calculado utilizando el factor de forma de la colectividad GOE. Al igual que en el ejemplo anterior, la correspondencia entre los valores teórico y numérico es prácticamente perfecta: la curva teórica describe tanto la parte lineal como las desviaciones a alta frecuencia. En este caso, además, la dimensión de las series es aún más pequeña: $N = 256$; es por lo tanto evidente que los resultados teóricos pueden aplicarse a los espectros que se obtienen habitualmente por simulación o en experimento.

En la figura 5.6 se muestra el mismo cálculo para los niveles de la realización

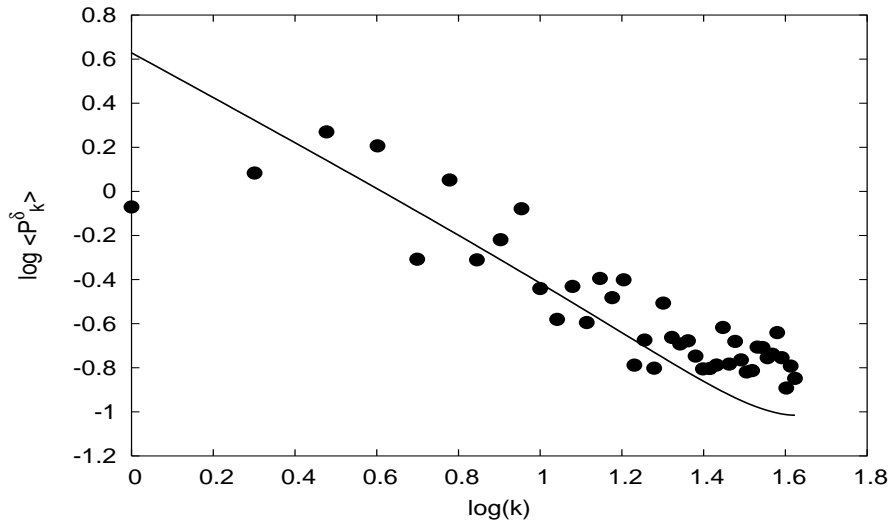


Figura 5.6: Comparación del espectro numérico de una realización experimental del billar de Sinai, calculada según se detalla en el capítulo 4, y la expresión teórica exacta para un sistema GOE.

experimental del billar de Sinai presentada en el capítulo 4. En este caso, la curva teórica no describe tan bien los resultados, sobre todo en el rango de frecuencias próximas a Nyquist; no obstante, el resultado sí es bueno en el rango de frecuencias donde la aproximación $\overline{P}_k^\delta \propto 1/k$ es válida. Teniendo en cuenta todas las limitaciones del cálculo numérico (véase el capítulo 4 para más detalles), el resultado puede considerarse bastante satisfactorio¹².

5.4. Conclusión

A la vista de todos los resultados obtenidos en este capítulo, la conjetura enunciada en la sección 4.5 puede considerarse corroborada con gran fiabilidad. El principal corolario que se deriva de esta conclusión es que el ruido $1/f$ es una característica intrínseca de los sistemas cuánticos caóticos.

¹²Nótese que no se ha ajustado parámetro libre alguno.

Capítulo 6

Sistemas intermedios

En los capítulos anteriores se han estudiado, numérica y analíticamente, los sistemas cuánticos caóticos y regulares, y se ha concluido que están caracterizados por ruidos $1/f$ y $1/f^2$ respectivamente. Para completar el trabajo, en este capítulo estudiamos desde el mismo punto de vista algunos sistemas intermedios entre la regularidad y el caos.

Como hipótesis de partida, parece razonable suponer que este tipo de sistemas deberían presentar un ruido $1/f^\alpha$, con $1 < \alpha < 2$; de este modo, el valor de α sería un indicador del grado de caos presente en el sistema. No obstante, en el capítulo 2 se vio que los sistemas intermedios no se comportan de forma universal; por esa razón, el estudio de unos pocos ejemplos concretos no es suficiente para formular una conjetura general.

A lo largo de este capítulo estudiamos dos ejemplos de sistemas intermedios: el billar de Robnik, que puede considerarse un paradigma entre estos sistemas, y la colectividad de matrices DGOE, que interpola entre el GOE y el GDE en función de un parámetro libre; según hemos dicho en el párrafo anterior, los resultados sirven para ilustrar el comportamiento de los sistemas intermedios, pero no para establecer una conjetura genérica. Además, al final del capítulo estudiamos también una colectividad de matrices aleatorias, que denominaremos genéricamente *Matrices de Lanczos* y que permite generar espectros con un nivel de repulsión mayor que cualquiera de las tres colectividades Gaussianas de matrices aleatorias; con este estudio profundizamos en la relación entre repulsión de niveles y antipersistencia en series temporales.

6.1. Billar de Robnik

Como ya se ha dicho en varias ocasiones a lo largo de esta tesis, los billares cuánticos se consideran el paradigma del caos cuántico; en esta sección aprovechamos sus

propiedades (véase sección 4.4) para estudiar la transición entre regularidad y caos. Hemos escogido la familia de billares *limaçon*, más conocida con el nombre genérico de *billar de Robnik* [79], porque da lugar a una transición genérica, según se detalla a continuación. Un estudio semejante puede abordarse en otros sistemas cuánticos, como el átomo de hidrógeno en un campo magnético; la principal desventaja de éste con respecto al billar de Robnik consiste en que la transición no puede considerarse genérica debido a la preponderancia de determinadas órbitas periódicas concretas para ciertos valores del campo magnético [80], lo cual origina efectos anómalos en las fluctuaciones espectrales.

6.1.1. Definición y propiedades del billar de Robnik

La principal característica del Billar de Robnik es que su contorno es analítico y depende de un parámetro λ que gobierna la transición. El contorno puede definirse como el conjunto de puntos $w \in \mathbb{C}$ que satisfacen $w = z + \lambda z^2$, donde $|z| = 1$. En el plano real (x, y) , el contorno puede parametrizarse

$$\begin{aligned} x(t) &= \sin(t) - \lambda \cos(2t) \\ y(t) &= \lambda \sin(2t) + \cos(t), \end{aligned} \tag{6.1}$$

con $0 \leq \lambda \leq 1/2$ y $0 \leq t \leq \pi$. En la figura 6.1 se muestra el contorno del billar para los valores de λ considerados en este trabajo.

La dinámica clásica del billar de Robnik es rica y evoluciona de manera suave con el parámetro λ . En [79] puede encontrarse una descripción bastante completa de sus propiedades globales: mapas de Poincaré, exponentes de Lyapunov, etc.; en [81] hay un análisis más detallado de sus órbitas periódicas. A continuación realizamos un breve resumen de sus propiedades más significativas:

- Si $\lambda = 0$, el sistema es integrable.
- Para valores pequeños de λ , el sistema es KAM: los toros se destruyen poco a poco según crece λ y existen órbitas periódicas estables rodeadas por islas de estabilidad [79, 81].
- Para $\lambda > 0.25$ ya no hay toros ni islas de estabilidad; las órbitas periódicas llenan el billar completamente, lo cual puede considerarse un signo de caos total. No obstante, el sistema no es ergódico, pues sigue habiendo una familia de órbitas estables de Lyapunov [82].
- Si $\lambda = 0.5$, el billar es ergódico (es decir, caótico, según la terminología que se está empleando en esta tesis doctoral) [83].

Además, el billar de Robnik carece de órbitas BBO, lo cual supone una clara ventaja con respecto a otros billares a la hora de cuantizar y analizar las fluctuaciones del espectro de energías.

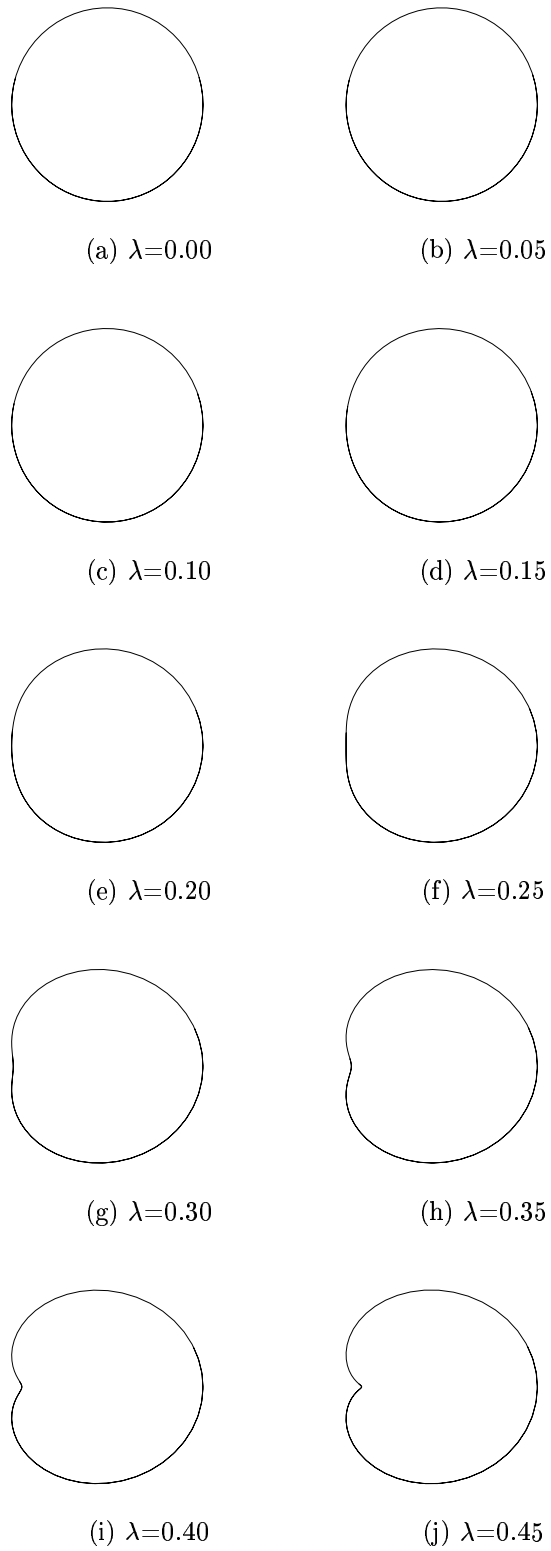


Figura 6.1: Esquema del billar de Robnik para los valores de λ considerados en este trabajo.

6.1.2. Cálculo de los autovalores y método de reescalado

La definición del contorno como una transformación del disco unidad en el plano complejo permite calcular los autovalores del sistema cuántico con relativa facilidad para cualquier valor de λ . El método de cálculo más sencillo consiste en desarrollar la verdadera función de ondas del billar en serie de funciones de Bessel, que son soluciones del billar circular, correspondiente a $\lambda = 0$. Para obtener numéricamente el espectro para un cierto valor de λ es necesario truncar la base de funciones de Bessel, de forma que sólo se obtienen con precisión suficiente un número finito de niveles a partir del fundamental; según aumenta λ , el número de niveles con precisión suficiente disminuye. En [84] se explica el método de cálculo con detalle.

Para estudiar las fluctuaciones del espectro, hay que considerar que el billar de Robnik es simétrico con respecto al eje de las abscisas, de modo que existen dos tipos de estados: los estados pares $\Psi(w) = \Psi(w^*)$ y los estados impares $\Psi(w) = -\Psi(w^*)$. La forma sencilla del contorno permite calcular en ambos casos $\bar{N}(E)$ con facilidad mediante la ley de Weyl; en el caso de las funciones pares, que son las que utilizamos en este trabajo

$$\bar{N}(E) = \frac{1 + 2\lambda^2}{8}E - \frac{(1 + 2\lambda)\mathcal{E}\left(\frac{\sqrt{8\lambda}}{1+2\lambda}\right) - 1}{2\pi}E^{1/2} - \frac{1}{24}, \quad (6.2)$$

donde $\mathcal{E}(x)$ es la integral elíptica completa de segunda especie

$$\mathcal{E}(x) = \int_0^1 dt \frac{\sqrt{1 - x^2t^2}}{\sqrt{1 - t^2}}. \quad (6.3)$$

Al no existir órbitas BBO, el proceso de reescalado es trivial.

6.1.3. Resultados

El cálculo de la función δ_n y de su espectro de potencias se realiza del mismo modo que en los capítulos anteriores. En esta ocasión, hemos dividido el espectro correspondiente a cada valor de λ en secuencias de 256 niveles, con el fin de evitar en la medida de lo posible los efectos anómalos producidos por órbitas de periodo muy corto; por el mismo motivo, no hemos utilizado los niveles más próximos al fundamental. En la tabla 6.1 presentamos el número de secuencias utilizadas para cada valor de λ ¹; se han utilizado todos los niveles disponibles entre una cota inferior de energía (que comentaremos a continuación) y la cota superior debida al truncamiento de la base.

¹No se incluye el caso $\lambda = 0.5$ porque presenta una no analiticidad en la frontera que da lugar a ciertos problemas en la secuencia de autovalores.

λ	0.00	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25	0.30	0.35	0.40	0.45
num	58	126	107	91	80	72	66	62	58	54

Tabla 6.1: Número de secuencias disponibles de $L = 256$ niveles para los distintos valores del parámetro λ .

La influencia de las órbitas periódicas de corto periodo puede determinarse según se explicó en la sección 4.4. El principal problema en este caso está en la determinación de la longitud de las órbitas de periodo más corto, que no resulta tan sencilla como en un estadio o un Sinai. En [79] se estudia con cierto detalle la geometría de las cinco órbitas de periodo más corto; los resultados que se obtienen son complejos y dependientes del parámetro λ en función de ecuaciones trascendentes. La selección de 256 niveles por secuencia se ha realizado teniendo en cuenta que para todos los valores de λ la órbita más corta es la horizontal en $y = 0$, que tiene una longitud $l_{min} = 4$ (en las unidades naturales del problema); en secuencias de $L = 256$, esta órbita puede afectar solamente al primer y al segundo punto del espectro de potencias². Para determinar con exactitud los efectos anómalos a bajas frecuencias habría que considerar también las frecuencias correspondientes a las siguientes órbitas periódicas; son de esperar, por lo tanto, diferentes anomalías a baja frecuencia en función de λ .

En la figura 6.2 representamos la función δ_n para una secuencia correspondiente a cada valor de λ . Hemos elegido la misma escala en todas las figuras para apreciar mejor cómo el aumento de repulsión con λ se manifiesta en la forma de δ_n .

En la figura 6.3 representamos el espectro de potencias medio para los valores de λ que se especifican en ella; en la tabla 6.2 adjuntamos los valores de α correspondientes al ajuste por mínimos cuadrados. En la figura se aprecia con bastante nitidez que la ley de potencias $P_\omega^\delta \propto \omega^{-\alpha}$ es una excelente aproximación para todos los valores de λ . Los valores obtenidos para α son coherentes con la dinámica clásica del sistema: para $\lambda < 0.25$, la presencia de toros invariantes hace que el sistema esté próximo a la regularidad; para $\lambda \geq 0.25$, la ausencia de este tipo de estructuras hacen que el sistema sea prácticamente caótico.

De los resultados obtenidos, dos cosas llaman poderosamente la atención. En primer lugar, el hecho de que la ley de potencias $P_\omega^\delta \propto \omega^{-\alpha}$ se verifique para cualquier valor de λ no puede explicarse según los argumentos teóricos presentados en el capítulo 2; en particular, la aplicación del PUSC conduce a un resultado del tipo $P_\omega^\delta = A/\omega + B/\omega^2$ [85]. Una posible explicación consiste en suponer que el sistema no está lo bastante cerca del límite semiclásico como para que los estados caóticos y los estados regulares sean independientes. Esta posibilidad sirve para descartar una ley

²El cálculo exacto da una frecuencia ω correspondiente a $k \approx 1.2$, donde $k = \omega L/2\pi$, según los diferentes valores de λ .

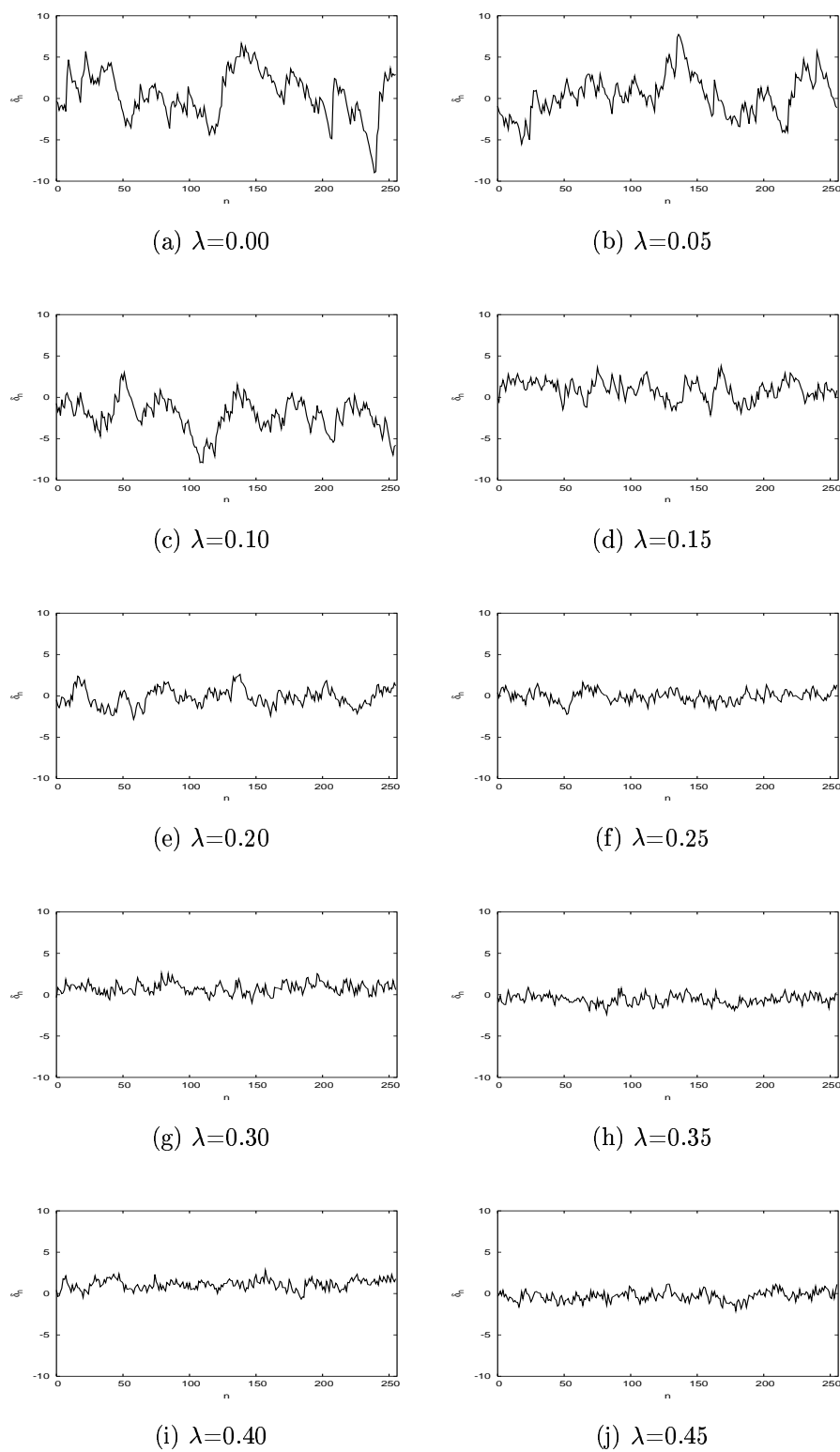


Figura 6.2: Función δ_n para una secuencia de $L = 256$ correspondiente a 10 billares de Robnik con distinto λ .

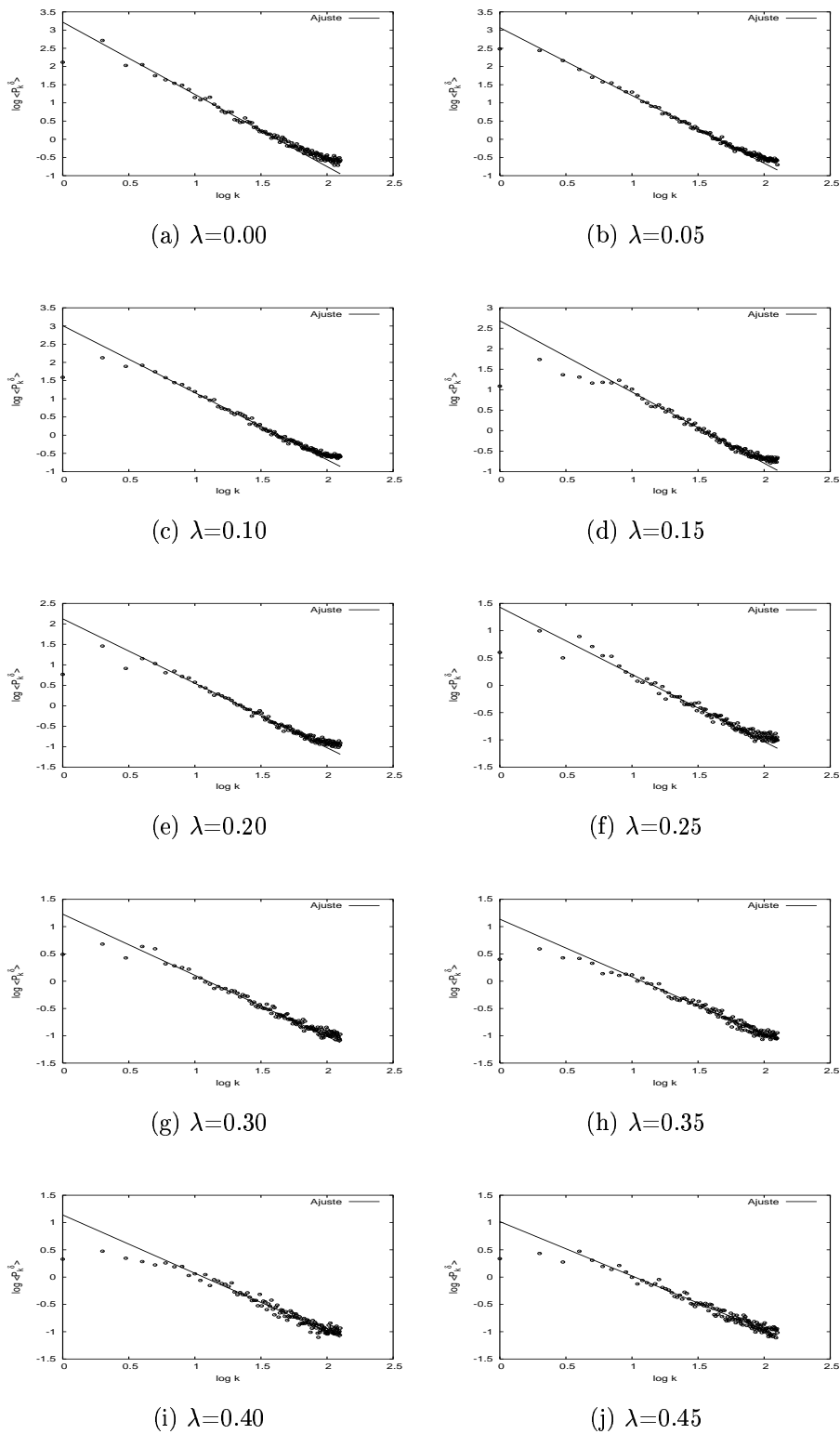


Figura 6.3: Espectro de potencias medio, calculado utilizando el número de secuencias que se indica en la tabla 6.1 de la función δ_n para billares de Robnik con distinto λ . La línea continua corresponde al ajuste por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$.

λ	α
0.00	1.92 ± 0.02
0.05	1.84 ± 0.01
0.10	1.86 ± 0.01
0.15	1.73 ± 0.02
0.20	1.60 ± 0.03
0.25	1.22 ± 0.03
0.30	1.13 ± 0.03
0.35	1.00 ± 0.03
0.40	1.03 ± 0.03
0.45	0.98 ± 0.03

Tabla 6.2: Valores del exponente α para billares de Robnik con distinto λ . El cálculo se ha realizado ajustando el espectro de potencias medio a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$.

del estilo $P_\omega^\delta = A/\omega + B/\omega^2$, pero no es suficiente para explicar el comportamiento $P_\omega^\delta \propto \omega^{-\alpha}$: para ello habría que determinar la amplitud del término mezcla entre estados caóticos y regulares y evaluar su influencia en el espectro de potencias de la función δ_n . En cualquier caso, los resultados obtenidos permiten completar la relación entre antipersistencia y repulsión de niveles postulada en el capítulo 4; al menos en este sistema, la aparición del caos, que se manifiesta clásicamente en la destrucción de los toros integrables y en la deslocalización del movimiento en el espacio de fases, da lugar a un aumento de la antipersistencia en el espectro de energías visto como una serie temporal. Las propiedades globales del billar de Robnik (su adecuación al teorema KAM y la analiticidad de su contorno) hacen pensar que este comportamiento podría ser general y caracterizar la transición entre regularidad y caos en sistemas con las mismas propiedades; no obstante, antes de obtener una conclusión habría que analizar otros sistemas.

En segundo lugar, los valores que se han obtenido para el parámetro α en función de λ muestran una transición brusca en $\lambda \approx 0.25$; a partir de este valor, en el espacio de fases clásico no existen toros integrables. No obstante, el valor $\alpha = 1$, correspondiente al caso ergódico, no se obtiene hasta $\lambda \approx 0.35$, lo que puede entenderse como un indicador de que aún existen ciertas órbitas estables para $\lambda > 0.25$. A este respecto, la función δ_n parece un buen indicador de lo que le ocurre al análogo clásico del sistema.

La estrecha relación entre el parámetro α y las propiedades de la dinámica clásica del sistema se ilustra en la figura 6.4, en la que se representa la variación de dicho parámetro en función de λ junto con la proporción del espacio de fases clásico ocupado por los toros integrables³ ρ_1^{cl} . En la figura se aprecia con nitidez que la

³Los valores de λ para los que se proporciona este último parámetro no coinciden con los del

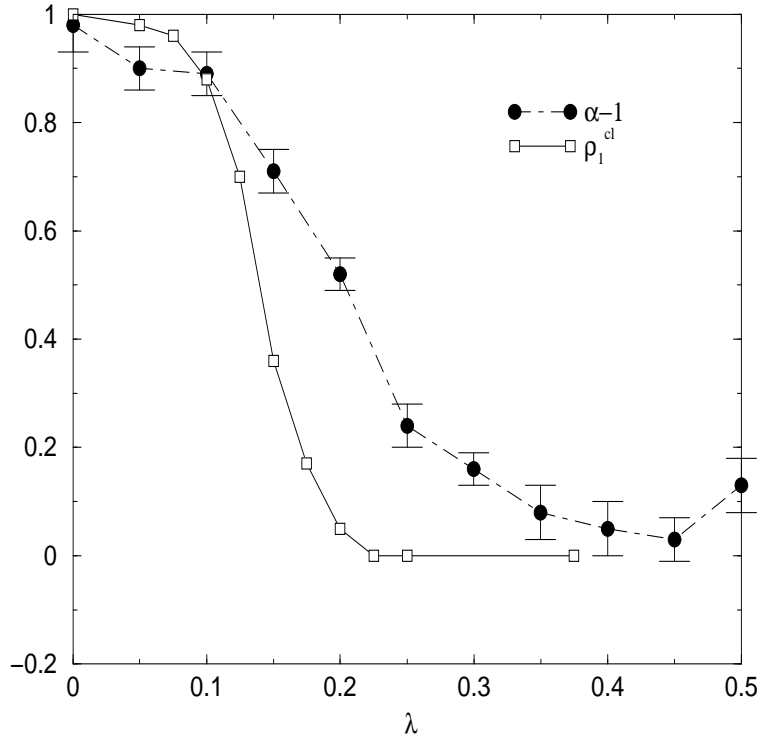


Figura 6.4: Comparación entre el exponente α del espectro de potencias de los billares de Robnik y la razón del volumen del espacio de fases clásico ρ_1^{cl} ocupada por los toros integrables.

evolución de α es más lenta que la de ρ_1^{cl} : para valores de λ en los que $\rho_1^{cl} \approx 0$, el exponente α es claramente mayor que $\alpha = 1$. Este resultado pone de manifiesto que el exponente no sólo α refleja la proporción entre las regiones caóticas y las regiones integrables del espacio de fases, sino también propiedades más sutiles como la estabilidad de las órbitas periódicas, que es la responsable que el sistema no sea ergódico para $\lambda = 0.25$, a pesar de que $\rho_1^{cl} \approx 0$.

Con el fin de dilucidar a partir de qué valor de λ las fluctuaciones del billar de Robnik son como las de los sistemas caóticos, hemos comparado el espectro de potencias numérico en un entorno de $\lambda = 0.25$ con la expresión teórica obtenida en el capítulo anterior para un sistema GOE con $N = 256$. En la figura 6.5 se presenta el resultado numérico junto con la curva teórica (línea sólida) y la recta correspondiente al ajuste a una ley de potencias (curva punteada). Estos resultados confirman que hasta $\lambda \approx 0.35$ las fluctuaciones del sistema no pueden considerarse caóticas: en los casos $\lambda = 0.20$, $\lambda = 0.25$ y $\lambda = 0.30$ se aprecia una diferencia clara entre la curva

resto de la sección porque se han utilizado los datos disponibles en [79].

teórica y el resultado numérico que va disminuyendo según aumenta λ . Además, este último resultado sirve para comprobar que la expresión teórica obtenida en el capítulo 5 es aplicable a sistemas semiclásicos.

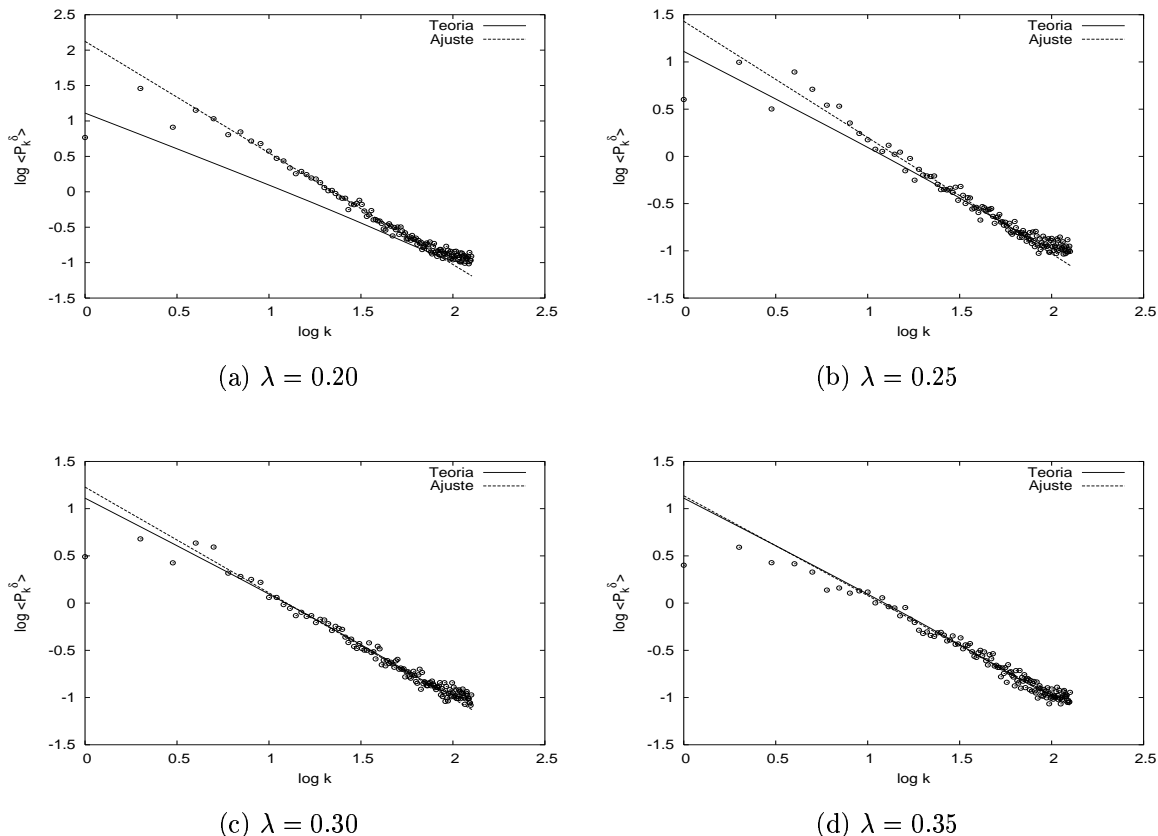


Figura 6.5: Comparación entre el espectro numérico de diferentes valores de λ del billar de Robnik con la curva teórica para un espectro caótico. La línea discontinua muestra el resultado del ajuste por mínimos cuadrados de los datos numéricos a una ley de potencias; la línea continua, la expresión teórica exacta para un sistema GOE.

6.2. Colectividad de matrices DGOE

Los resultados obtenidos en la sección anterior son muy interesantes, pero han de ser contrastados antes de utilizarse como base de una conjetura general. Una buena forma de estudiar las fluctuaciones espectrales de sistemas intermedios entre el caos y la regularidad consiste en acudir a un modelo de matrices aleatorias, ya que éstas son un paradigma en la descripción del caos cuántico. La ausencia de universalidad en

sistemas intermedios imposibilita, sin embargo, la definición de una colectividad que describa de manera genérica las fluctuaciones de este tipo de sistemas; en su lugar existen varias propuestas, cada una de las cuales es más adecuada a determinado tipo de sistemas. En esta sección estudiamos una de las colectividades más citadas en la literatura: la colectividad de matrices DGOE⁴.

6.2.1. Definición de la colectividad DGOE

Considérese una matriz aleatoria H caracterizada por una distribución de probabilidad $P(H)$ y sometida a unas ciertas restricciones; en el caso de la RMT, éstas son invariación bajo un determinado tipo de transformaciones e independencia estadística de los elementos de la matriz. Una forma de obtener la distribución de probabilidad más adecuada con las restricciones impuestas es imponiendo que ésta contenga sólo la información necesaria para el cumplimiento de éstas. Extendiendo el concepto termodinámico de entropía, se puede definir una magnitud

$$\mathcal{I}[P(H)] = - \int dH P(H) \log[P(H)], \quad (6.4)$$

que mide la entropía, esto es, la información asociada a la distribución de probabilidad $P(H)$. La maximización de esta cantidad, $\delta\mathcal{I}[P(H)] = 0$, junto con las restricciones impuestas (que se pueden implementar, por ejemplo, con el método de los multiplicadores de Lagrange), dan como resultado la distribución $P(H)$ más adecuada.

El objetivo que se persigue al construir la colectividad DGOE es obtener una colectividad de matrices aleatorias que describa la transición entre regularidad y caos de la forma más general posible. Como se vio en el capítulo 4, el caos se describe mediante la colectividad GOE⁵, mientras que la regularidad queda bien descrita por una matriz diagonal. Resulta conveniente, por lo tanto, definir los operadores $P_i = |i\rangle\langle i|$ y $Q_i = 1 - P_i$, donde $|i\rangle$, con $i = 1, 2, \dots, N$, son los vectores de la base; así, un hamiltoniano general H puede descomponerse en una parte diagonal H_0 y en una parte no diagonal H_1 , tales que $H = H_0 + H_1$ [86]

$$H_0 = \sum_{i=1}^N P_i H P_i \quad (6.5)$$

$$H_1 = \sum_{i=1}^N P_i H Q_i. \quad (6.6)$$

⁴Siglas del inglés *Deformed Gaussian Orthogonal Ensemble*, que se puede traducir como *Colectividad de Ortogonal Gaussiana Deformada*.

⁵En esta sección nos referiremos siempre a sistemas con simetría GOE. Para otro tipo de sistemas pueden construirse colectividades DGUE y DGSE siguiendo el mismo procedimiento.

A partir de esta división, la distribución $P(H)$ para la transición puede obtenerse a partir del principio de máxima entropía añadiendo a las restricciones habituales para el GOE

$$\langle \text{Tr} H^2 \rangle = \int dH P(H) \text{Tr} H^2 = \mu \quad (6.7)$$

$$\langle 1 \rangle = \int dH P(H) = 1, \quad (6.8)$$

la condición [86]

$$\langle \text{Tr} H_1^2 \rangle = \sum_{i=1}^N \int dH P(H) \text{Tr}(P_i H Q_i H P_i) = \nu. \quad (6.9)$$

De este modo, los parámetros μ y ν quedan libres y su relación determina la proximidad al caos o a la regularidad. La distribución de probabilidad que se obtiene es

$$P(H) = P_{GOE}(H) \exp \left[-\beta \sum_{i=1}^N \text{Tr}(P_i H Q_i H P_i) \right] \left(1 + \frac{\beta}{\alpha} \right)^{\frac{N}{4(N-1)}}, \quad (6.10)$$

donde α y β son multiplicadores de Lagrange y $P_{GOE}(H)$ es la distribución de probabilidad para el GOE. Según la expresión anterior, cuando $\beta \rightarrow 0$ se recupera el GOE, y cuando $\beta \rightarrow \infty$ se obtiene Poisson.

Una manera diferente de llegar al mismo resultado consiste en considerar que el hamiltoniano parcialmente caótico es la solución de un conjunto de ecuaciones de Langevin para un determinado tiempo t [87]. La distribución de probabilidad que resulta de ello es

$$P(H, t) \propto \left[\prod_i \exp \left(-\frac{H_{ii}^2}{2a^2} \right) \right] \left[\prod_{i<j} \exp \left(-\frac{H_{ij}^2}{a^2 \epsilon^2} \right) \right], \quad (6.11)$$

donde el parámetro ϵ se escribe en función del tiempo $\epsilon^2 = 1 - \exp(-t/2a^2)$. Según este resultado, en el estado inicial, $t = 0$, el sistema es regular y en el estado final, $t = \infty$, el sistema es GOE. La relación entre este formalismo y el anterior es

$$\epsilon = \frac{1}{\sqrt{1 + \beta/\alpha}}. \quad (6.12)$$

La colectividad DGOE puede obtenerse, además, como un caso particular de un modelo más genérico para construir hamiltonianos mezcla [88]

$$H = \frac{H_0 + \lambda V}{\sqrt{1 + \lambda^2}}, \quad (6.13)$$

donde H_0 y V son los límites de la transición. La colectividad DGOE puede recuperarse tomando H_0 como una matriz GDE y V como una matriz GOE con

$$\epsilon = \frac{\lambda}{1 + \lambda}. \quad (6.14)$$

La ecuación (6.13) pone de manifiesto que la colectividad DGOE está compuesta por hamiltonianos separables en una parte regular y en una parte caótica. Según la teoría expuesta en la sección 2.3.6, este tipo de hamiltonianos parecen una buena elección para la descripción de sistemas intermedios cerca del límite semiclásico, donde se supone que las partes regulares y caóticas del espacio de fases dan lugar a espectros independientes que se superponen para componer el espectro del sistema completo; puede considerarse que (6.13) se corresponde con (2.83) con $V_{RC} = 0$. En cualquier caso, no parece probable que la colectividad DGOE pueda describir todo tipo de transiciones integrabilidad-caos; en particular, la obtenida con el billar de Robnik en la sección anterior no parece coincidir con este modelo.

6.2.2. Cálculo de autovalores y método de reescalado

El cálculo de los autovalores para cualquier valor de ϵ es tan sencillo como en el caso de una matriz GOE: basta con generar los elementos diagonales y no diagonales con las varianzas adecuadas según la ecuación (6.11).

El método de reescalado, por el contrario, es un poco más complicado, ya que no existe una fórmula analítica para $\overline{N}(E)$ en función de ϵ , salvo en los casos triviales $\epsilon = 0$ y $\epsilon = 1$. En este trabajo hemos utilizado un desarrollo en polinomios de Chebyshev para ajustar $\overline{N}(E)$, según se explica en el apéndice C. Además, hemos realizado el reescalado de cada matriz de forma independiente, tal y como hicimos con las matrices EGOE; al igual que entonces, las dos o tres frecuencias más bajas presentan efectos anómalos.

6.2.3. Resultados

Una vez generados y reescalados los autovalores, el cálculo de la función δ_n y su espectro de potencias promedio es trivial. En primer lugar, hemos realizado los cálculos para una dimensión concreta, y luego hemos estudiado la evolución del sistema en función del tamaño de la matriz, con el fin de extraer alguna conclusión para el límite $N \rightarrow \infty$.

Cálculo para $N=2000$

En la figura 6.6 se muestra la función δ_n para ocho valores escogidos del parámetro ϵ ; en todas las gráficas se ha adjuntado un panel en la esquina superior derecha en el

que se amplía la señal en un intervalo determinado⁶. Una simple inspección muestra que la autosimilaridad no es evidente para valores intermedios del parámetro ϵ , en especial para los casos entre $\epsilon = 1/80$ y $\epsilon = 1/250$: en la señal completa se observan oscilaciones de largo periodo que no se reproducen en los fragmentos ampliados.

En la figura 6.7 se muestra el espectro de potencias promedio (calculado con 30 matrices) para los mismos valores de ϵ que en la figura anterior; junto al resultado se han dibujado las curvas teóricas para un sistema integrable y para un sistema caótico. Las figuras muestran con nitidez que la transición entre el caos y la regularidad no se hace según una ley de potencias $P_\omega^\delta \propto \omega^{-\alpha}$, sino que las frecuencias bajas se aproximan a la curva regular antes que las frecuencias altas. Este comportamiento es coherente con lo que se observa a simple vista en la función δ_n : las oscilaciones de largo periodo que aparecen para valores intermedios de ϵ se manifiestan en el incremento del espectro de potencias a frecuencias bajas, mientras que a frecuencias altas éste coincide aún con el del GOE. Además, esta falta de autosimilaridad es cualitativamente consistente con una descripción del tipo $P_{DGOE} = A(\epsilon)P_{GOE} + B(\epsilon)P_{GDE}$, que se obtiene aplicando el PUSC [85]; el ajuste de los parámetros A y B es, sin embargo, demasiado delicado como para que sea posible obtener resultados significativos. En cualquier caso, los resultados son lo bastante claros para concluir que la colectividad DGOE no sirve como modelo de la transición que se observa en el billar de Robnik.

Cálculo para $\epsilon=1/500$

La RMT estándar⁷ describe correctamente las fluctuaciones de los sistemas cuánticos caóticos en el límite $N \rightarrow \infty$. En la sección anterior hemos caracterizado la transición entre regularidad y caos para una matriz lo bastante grande para suponer que reproduce con bastante fidelidad lo que ocurre en el límite $N \rightarrow \infty$; los resultados de la RMT estándar se reproducen con matrices bastante más pequeñas. Sin embargo, en muchas ocasiones el estudio numérico de fenómenos parecidos, como las transiciones de fase, se ve afectado por efectos de tamaño finito⁸ que no desaparecen rápidamente al aumentar el tamaño del sistema. En esta sección abordamos este problema estudiando lo que le sucede a los hamiltonianos DGOE al aumentar el tamaño de la matriz para un valor fijo del parámetro.

En la figura 6.8 se representa el espectro de potencias promedio para matrices de dimensión $N = 250$, $N = 500$, $N = 1000$, $N = 2000$, $N = 4000$ y $N = 8000$ con $\epsilon = 1/500$; se ha utilizado $\omega = 2\pi k/N$ como variable independiente porque

⁶Se han seleccionado regiones diferentes en los distintos casos con el fin de apreciar con mayor claridad las fluctuaciones.

⁷En general se entiende como tal al conjunto de las colectividades Gaussianas GOE, GUE y GSE.

⁸La terminología habitual para este tipo de fenómenos es *Finite Size Scaling*.

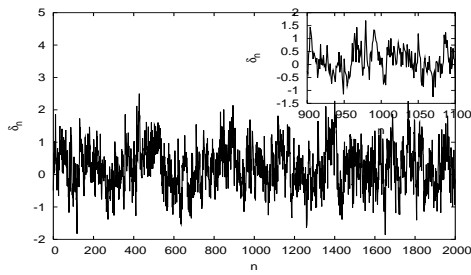
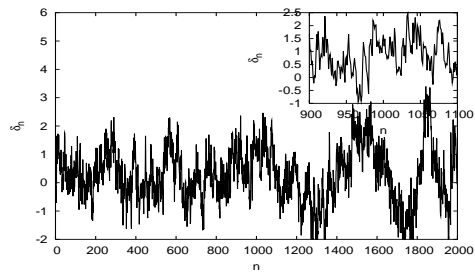
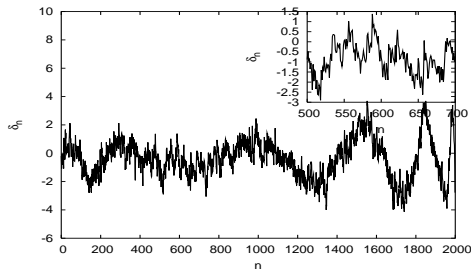
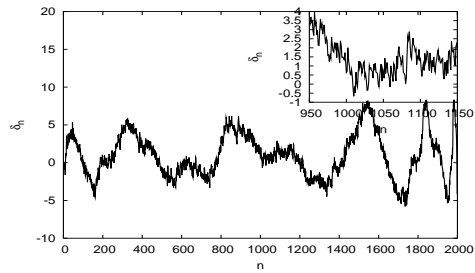
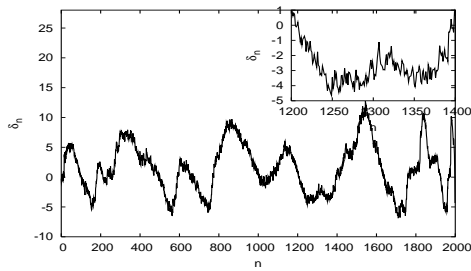
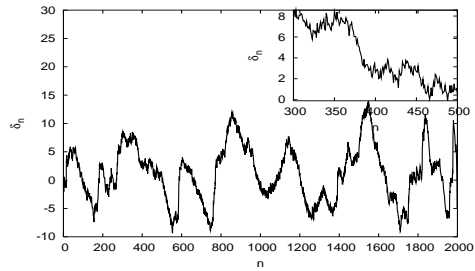
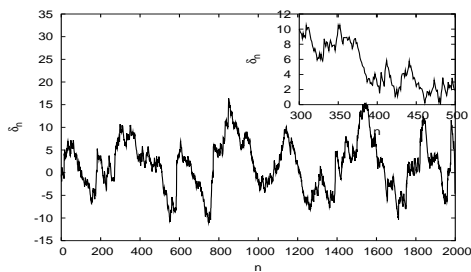
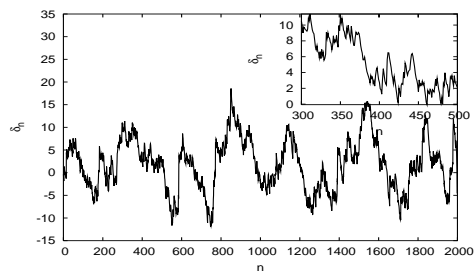
(a) $\epsilon = 1$ (b) $\epsilon = 1/60$ (c) $\epsilon = 1/80$ (d) $\epsilon = 1/150$ (e) $\epsilon = 1/250$ (f) $\epsilon = 1/400$ (g) $\epsilon = 1/1000$ (h) $\epsilon = 1/5000$

Figura 6.6: Función δ_n para matrices DGOE con $N = 2000$ y diferente ϵ . En los paneles superiores se muestra la señal ampliada para un rango significativo de valores de n .

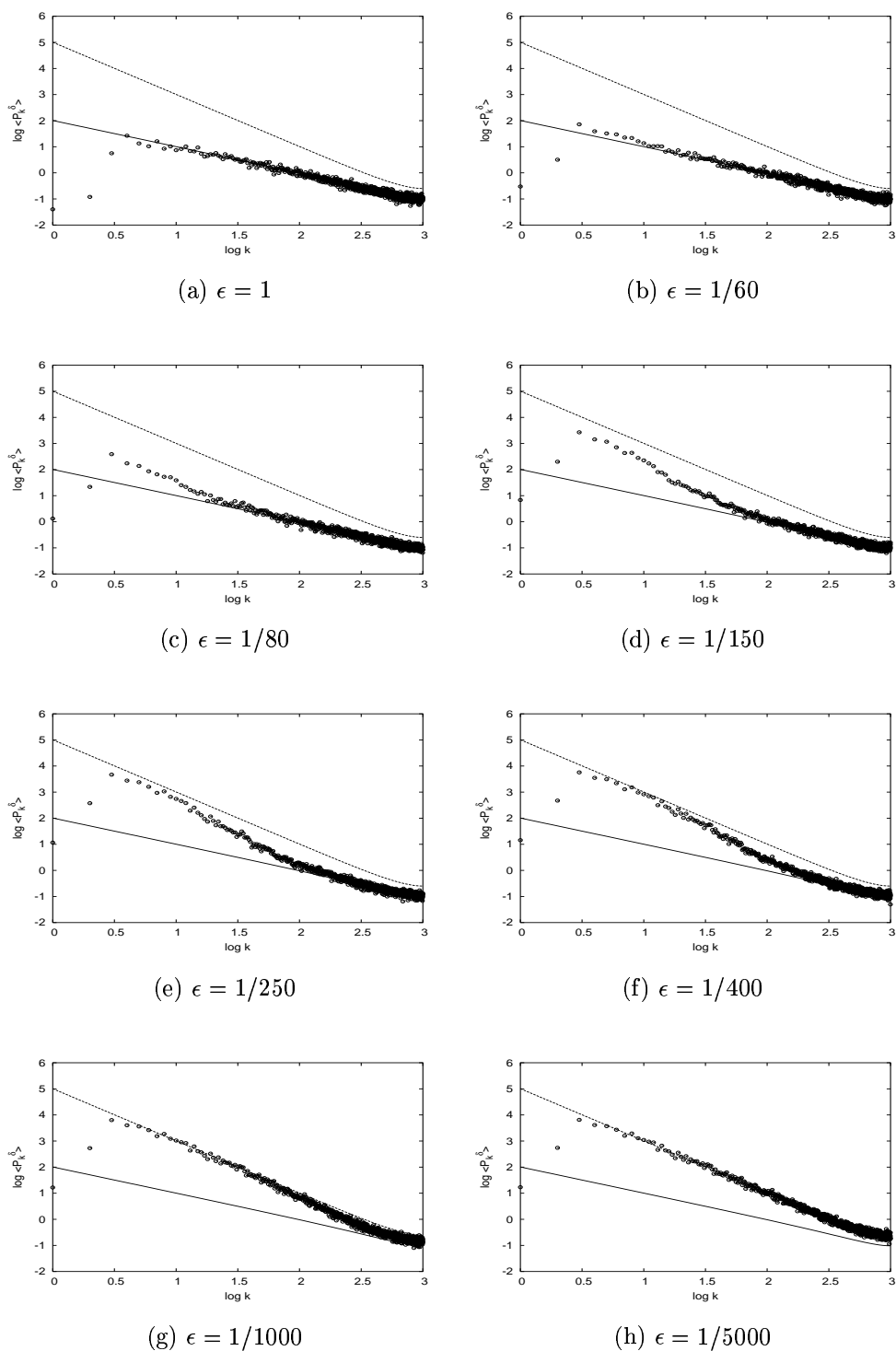


Figura 6.7: Espectro de potencias medio para matrices DGOE con $N = 2000$ y diferente ϵ . La línea continua representa la expresión teórica exacta para un sistema GOE, y la línea discontinua, la expresión teórica exacta para un sistema integrable.

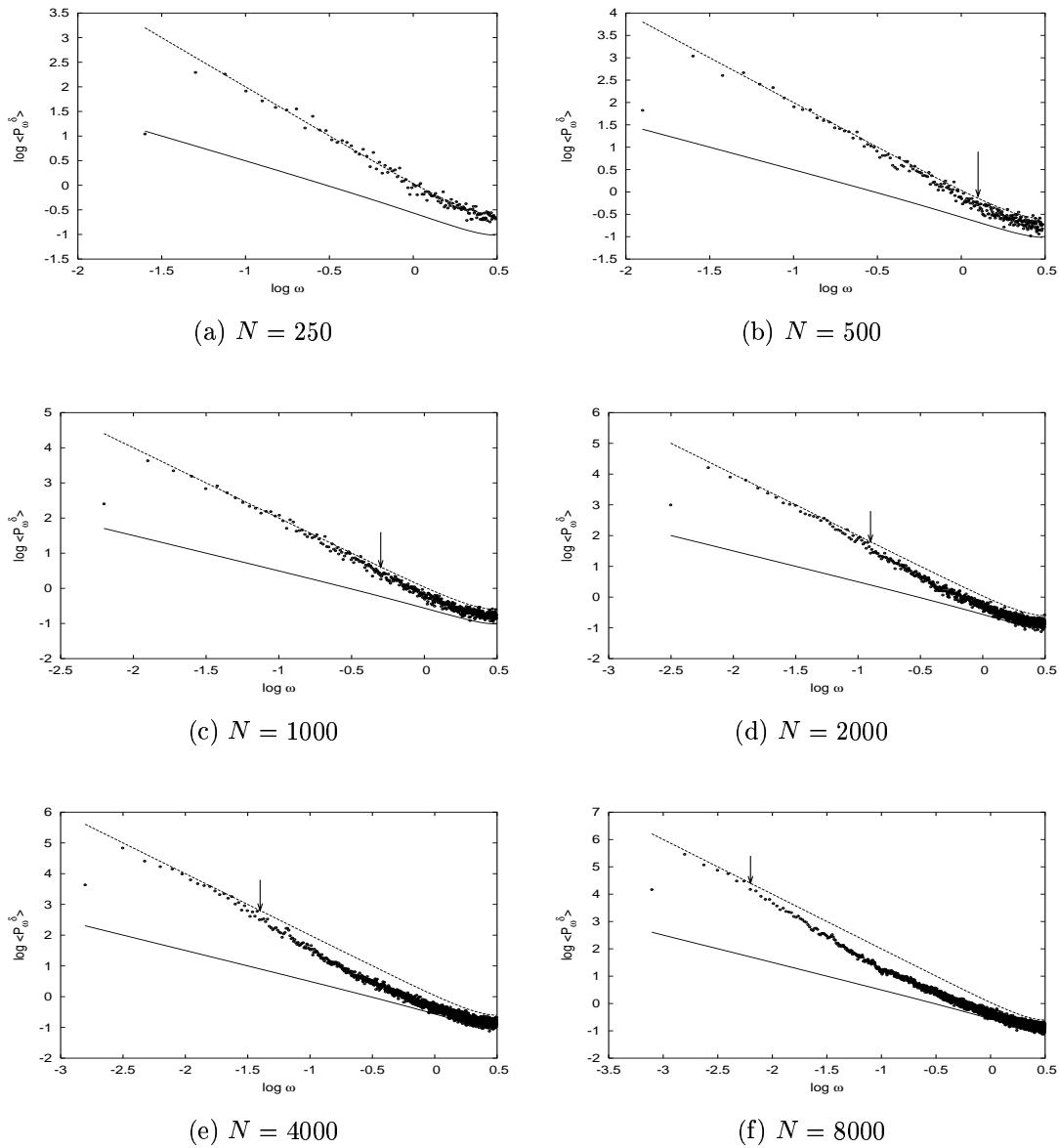


Figura 6.8: Espectro de potencias medio para matrices DGOE con $\epsilon = 1/500$ y diferentes dimensiones. La línea continua representa la expresión teórica exacta para un sistema GOE; la línea discontinua, la expresión teórica exacta para un sistema integrable, y las flechas indican la frecuencia a la que el espectro se aleja de la integrabilidad.

el contador k depende del tamaño del sistema; junto a los resultados numéricos se representan las curvas teóricas para un sistema integrable y para un sistema caótico. Las gráficas muestran con claridad los cambios que experimenta el sistema al aumentar el tamaño de la matriz. El hamiltoniano $N = 250$ puede considerarse integrable: su espectro de potencias reproduce la curva teórica para casi todo el rango de frecuencias, salvo las anomalías a baja frecuencia debidas al reescalado; en todo caso puede observarse una pequeña discrepancia (la curva teórica no pasa exactamente por el centro de la nube de puntos numéricos) a muy alta frecuencia. El resto de los paneles de la figura pone de manifiesto que el aumento del tamaño del sistema tiene consecuencias muy significativas; con el fin de que el lector pueda apreciar mejor estas diferencias, en las distintas gráficas se indica con una flecha la frecuencia aproximada en la que el sistema se aleja de la integrabilidad, que denominamos frecuencia crítica ω_c . A partir de $N = 1000$ ya se empiezan a observar diferencias importantes con respecto al valor teórico para un sistema integrable: a altas frecuencias hay una desviación apreciable con respecto a la curva teórica para sistemas integrables. El hamiltoniano más grande que se ha utilizado, $N = 8000$, es especialmente significativo, ya que solamente unas pocos puntos a bajas frecuencias se disponen sobre la curva integrable, y a muy altas frecuencias el resultado se aproxima mucho a la curva caótica.

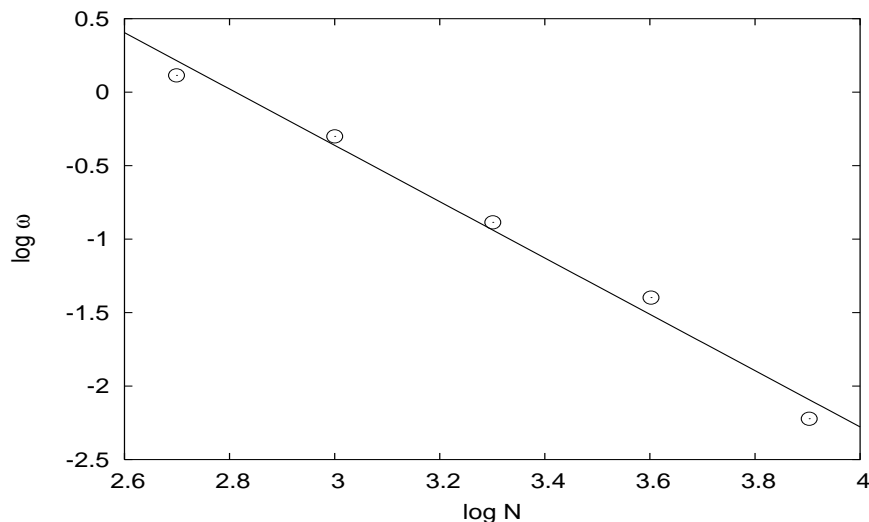


Figura 6.9: Frecuencia a la cual el sistema deja de ser integrable en función del tamaño de la matriz. La línea representa un ajuste a una ley de potencias $\omega_c \propto N^\gamma$.

La principal conclusión que se obtiene a partir de estos resultados es que la transición entre integrabilidad y caos se desplaza hacia valores menores del parámetro ϵ al aumentar la dimensión de las matrices utilizadas para el cálculo. El rango

de dimensiones que hemos considerado es quizá demasiado pequeño⁹ para obtener una conclusión definitiva, pero los resultados son compatibles con que la transición empiece a producirse en $\epsilon = 0$ cuando $N \rightarrow \infty$. En la figura 6.9 se muestra una representación de la frecuencia ω_c a la cual el sistema deja de ser integrable (marcada con una flecha en la figura 6.8) en función del tamaño de la matriz; se presenta en escala logarítmica para que el lector aprecie mejor la rápida disminución de la frecuencia crítica al aumentar N . Junto con los datos se presenta el resultado de un ajuste lineal por mínimos cuadrados. El número de puntos es pequeño para obtener una conclusión significativa, pero los resultados muestran con claridad que el ritmo de disminución de la frecuencia crítica en función de N no disminuye para valores grandes de N , de modo que se puede postular que $\omega_c \rightarrow \infty$ cuando $N \rightarrow \infty$.

A raíz de todos estos resultados parece evidente que la colectividad DGOE no sirve para describir con precisión algunos sistemas físicos que están entre la regularidad y el caos, como el billar de Robnik.

6.3. Transición hacia el espectro equiespaciado: matrices Lanczos

Uno de los resultados más importantes de la presente tesis doctoral es el establecimiento de una relación entre la repulsión de niveles y la antipersistencia en series temporales. Según los resultados presentados en el capítulo 4 y la argumentación teórica del capítulo 5, el caos cuántico se caracteriza por series temporales en el límite de antipersistencia; la intensidad de la repulsión, diferente según las simetrías del hamiltoniano del sistema (máxima en el GSE y mínima en el GOE), no se manifiesta en el grado de antipersistencia de la función δ_n . En las dos secciones anteriores se ha mostrado que la transición entre regularidad y caos puede manifestarse en forma de serie parcialmente antipersistente, pero no todos los sistemas presentan este comportamiento; lo único que parece universal es la máxima antipersistencia en el límite caótico. A continuación estudiamos la transición desde un espectro GOE a un espectro equiespaciado (con repulsión infinita o *congelado*) con el fin de determinar qué ocurre con la antipersistencia de la serie temporal si se aumenta la repulsión de forma dramática. Además de para la caracterización de la antipersistencia, este estudio puede servir para estudiar transición metal-aislante, que en algunos sistemas se manifiesta en una transición desde un espectro caótico a un espectro congelado (véanse, por ejemplo, [89] y sus referencias).

⁹Desgraciadamente, el coste computacional de la diagonalización de matrices es muy elevado. Los algoritmos utilizados en esta tesis doctoral necesitan un tiempo $t \propto N^3$, de modo que resulta imposible aumentar mucho el tamaño de las matrices. Además, si los elementos almacenados exceden la capacidad de la memoria RAM, el proceso de cálculo se ralentiza de forma dramática.

6.3.1. Definición de las matrices Lanczos

Considérese un hamiltoniano H y un conjunto de estados $|0\rangle, H|0\rangle, H^2|0\rangle, \dots, H^{N-1}|0\rangle$, donde H y $|0\rangle$ tienen que ser reales con respecto a algún tipo de conjugación compleja generalizada definida por un operador antiunitario. Si se construye una nueva base ortonormalizando el conjunto anterior, el hamiltoniano H se expresa en dicha base en forma de una matriz tridiagonal, y sus elementos se distribuyen siguiendo unas leyes concretas: los diagonales fluctúan alrededor de una constante; los no diagonales, alrededor de una ley proporcional a la inversa de densidad de estados [90]. En un trabajo reciente [91] se muestra, además, que las fluctuaciones de los elementos de matriz son responsables de la repulsión de niveles y las propiedades de las fluctuaciones del espectro.

Considérese ahora una matriz GOE escrita en forma tridiagonal según el procedimiento anterior, H_{GOE} . La distribución de los elementos de esta matriz se conoce teóricamente: los elementos diagonales están centrados en cero y los no diagonales se distribuyen alrededor de una ley $H_{i,i+1} = \sqrt{1 - i/N}$. Utilizando estas leyes, es posible construir a partir de H_{GOE} una nueva matriz H_{GOE}^F

$$H_{GOE}^F = H_{GOE}^S + F (H_{GOE} - H_{GOE}^S), \quad (6.15)$$

donde H_{GOE}^S representa la parte suave de la matriz descrita por las leyes anteriores. El parámetro libre F indica la amplitud de las fluctuaciones de la matriz: si $F = 1$, se recupera una matriz GOE, y si $F = 0$ permanece sólo la parte suave. En este trabajo denominamos colectivamente a matrices Lanczos a H_{GOE}^F para cualquier valor de F .

6.3.2. Cálculo de autovalores y método de reescalado

Conceptualmente, el cálculo de los autovalores de una matriz Lanczos para cualquier valor de F es trivial: primero se construye la matriz tridiagonal según el procedimiento explicado en la sección anterior, y después se diagonaliza de manera habitual. Sin embargo, el cálculo de la base $|0\rangle, H|0\rangle, H^2|0\rangle, \dots, H^{N-1}|0\rangle$ es en general muy costoso, ya que es necesario ortonormalizar el conjunto una vez generado. Una manera mucho menos costosa de obtener la representación tridiagonal de una matriz consiste en seleccionar un vector cualquiera normalizado $|0\rangle$ y realizar la siguiente operación [92]:

$$H|0\rangle = \langle 0|H|0\rangle |0\rangle + [H - \langle 0|H|0\rangle] |0\rangle \equiv H_{00}|0\rangle + |1'\rangle. \quad (6.16)$$

El estado $|1'\rangle$ es ortogonal a $|0\rangle$; normalizándolo se obtiene el vector $|1\rangle$, que es el segundo vector de la base tridiagonal. Aplicando a continuación H al vector $|1\rangle$

se obtiene $|2' \rangle$, que, normalizado a $|2 \rangle$, constituye el tercer vector de la base. De forma general, el vector $|(m+1)'\rangle$ se obtiene

$$H|m \rangle = H_{mm-1}|m-1 \rangle + H_{mm}|m \rangle + |(m+1)'\rangle. \quad (6.17)$$

Una vez obtenida y diagonalizada la matriz Lanczos, el método de reescalado es muy sencillo: para valores pequeños de F , la intensidad de las fluctuaciones no altera la densidad de estados, de manera que la parte suave de las matrices H_{GOE}^F sigue la misma ley H_{GOE}^S para todo valor de F ¹⁰.

6.3.3. Resultados

En esta sección estudiamos las fluctuaciones del matrices Lanczos con $0 < F < 1$, es decir, la transición entre un espectro caótico y un espectro congelado (equiespaciado)¹¹. Para observar de forma cualitativa cómo se produce la transición, en la figura 6.10 se representan 20 niveles consecutivos de matrices Lanczos con $F = 1.0$, $F = 0.5$, $F = 0.4$, $F = 0.3$, $F = 0.2$ y $F = 0.1$.

La forma más habitual y sencilla de medir la intensidad de la repulsión es mediante la distribución de espaciamientos de próximos vecinos $P(s)$: para valores pequeños de s , se puede aproximar $P(s) \sim s^\beta$, donde β indica la repulsión. Para analizar las matrices Lanczos resulta muy conveniente ajustar la $P(s)$ obtenida numéricamente a la distribución fenomenológica de Izrailev (2.85)

$$P(s, \beta_{ef}) = A_{\beta_{ef}} s^{\beta_{ef}} \exp \left(-\frac{\pi^2 \beta_{ef}}{16} s^2 - \left[B_{\beta_{ef}} - \frac{\pi \beta_{ef}}{4} \right] s \right), \quad (6.18)$$

ya que esta distribución permite interpolar entre un espectro caótico y un espectro equiespaciado, $P(s) = \delta(s-1)$ en función de un parámetro efectivo. En la figura 6.11 se muestran las distribuciones de espaciamientos obtenidas para una matriz con cada uno de los valores de F anteriores, junto con el resultado del ajuste a la distribución de Izrailev; en la tabla 6.3 se presentan los valores obtenidos para el parámetro β . El resultado expresa cuantitativamente lo que se observa en la figura 6.10 de forma cualitativa: cómo la repulsión crece dramáticamente al disminuir F en un orden de magnitud. Además, los valores obtenidos para β se corresponden bastante bien con la relación propuesta en [91]

$$\beta = \frac{1}{F^2}. \quad (6.19)$$

¹⁰No existe un criterio general para determinar qué se entiende por un valor “pequeño” de F . Desde un punto de vista práctico, se observa que a partir de un cierto valor de F empieza a perderse la ergodicidad, de forma que no siempre es posible reescalar cada matriz utilizando una misma ley para $\overline{N}(E)$.

¹¹Como se ha dicho antes, $F = 0$ implica que sólo permanece la parte suave del espectro; al realizarse el reescalado $\langle s \rangle = 1$, de modo que $E_{i+1} - E_i = 1 \forall i$, tal y como ocurre en un espectro congelado.



Figura 6.10: Espectro de energías para matrices H_{GOE}^F con distintos valores de F .

Esta última expresión permite comprender cualitativamente el tipo de espectro que se obtiene con los distintos valores de F . Además del caso trivial, $F = 1$, que da lugar a un espectro GOE ($\beta = 1$), con ayuda de esta expresión resulta evidente que si $F \rightarrow \infty$ el espectro resultante es regular, ya que en este caso $\beta \rightarrow 0$; del mismo modo, se comprende que el caso $F = 0$, que conserva tan sólo la parte suave del espectro, da lugar a un espectro equiespaciado. Nótese también que para $F < 0.5$ la repulsión es mayor que en la colectividad GSE ¹².

Una vez caracterizada la repulsión en función de la amplitud de las fluctuaciones F , pasamos a estudiar el espectro mediante la función δ_n . En la figura 6.12 se muestra la función δ_n para una matriz de cada valor de F ; representamos todas las figuras con la misma escala para que se aprecien mejor los efectos de la repulsión. A partir de estos resultados parece evidente que el principal efecto del aumento de la repulsión es una clara disminución en la amplitud de las fluctuaciones de la función δ_n ; por el contrario, el aspecto global de la señal no parece modificarse demasiado.

En la figura 6.13 se presenta el espectro de potencias promedio de la función δ_n , calculado con 30 matrices para cada valor de F ; junto a los datos numéricos se

¹²Esa es la razón por la cual hemos escogido este conjunto de valores de F .

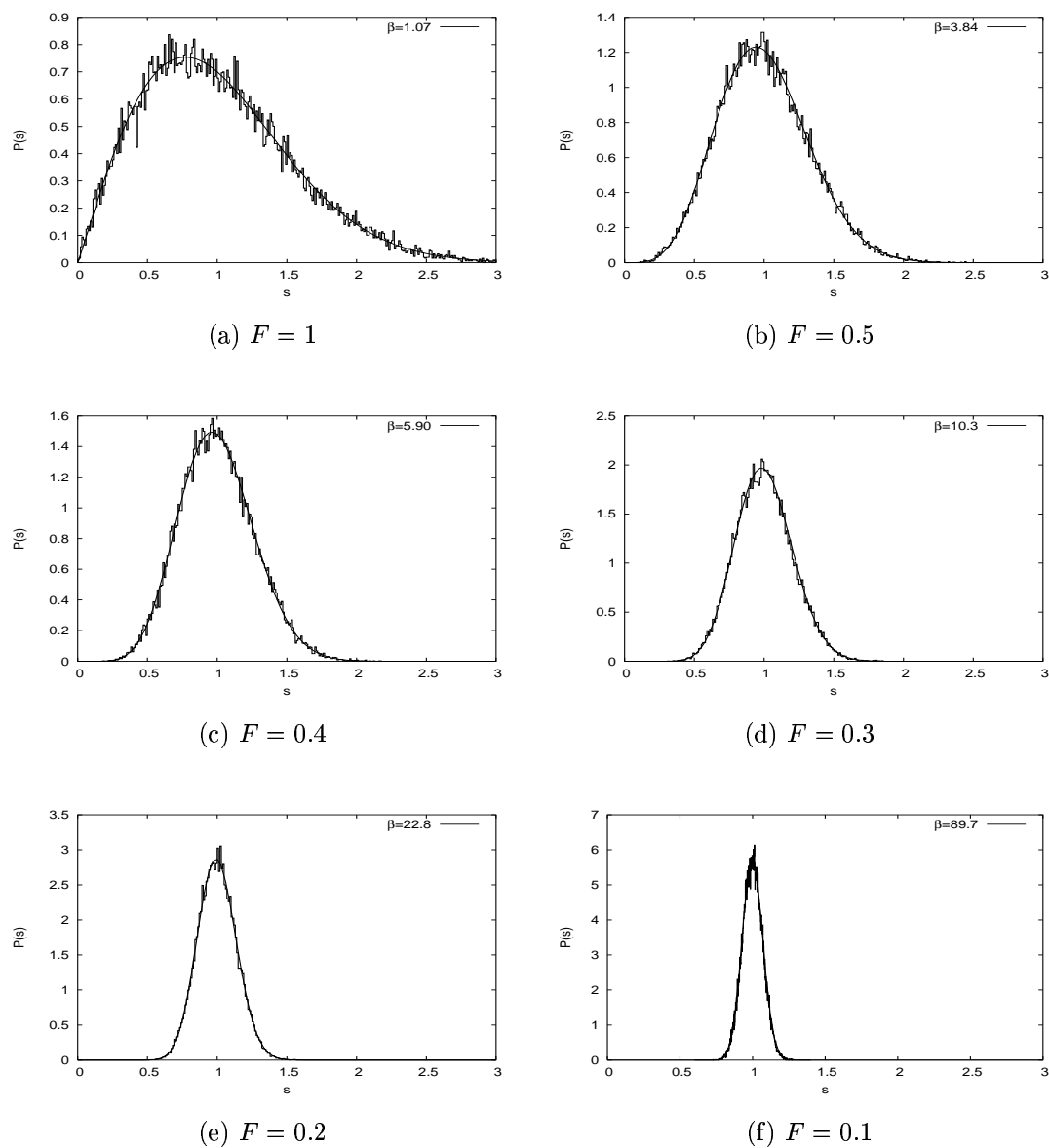


Figura 6.11: Distribución $P(s)$ para matrices Lanczos con distinto valor de F . El histograma representa el valor numérico y la línea continua el ajuste por mínimos cuadrados a la distribución de Izrailev (2.85).

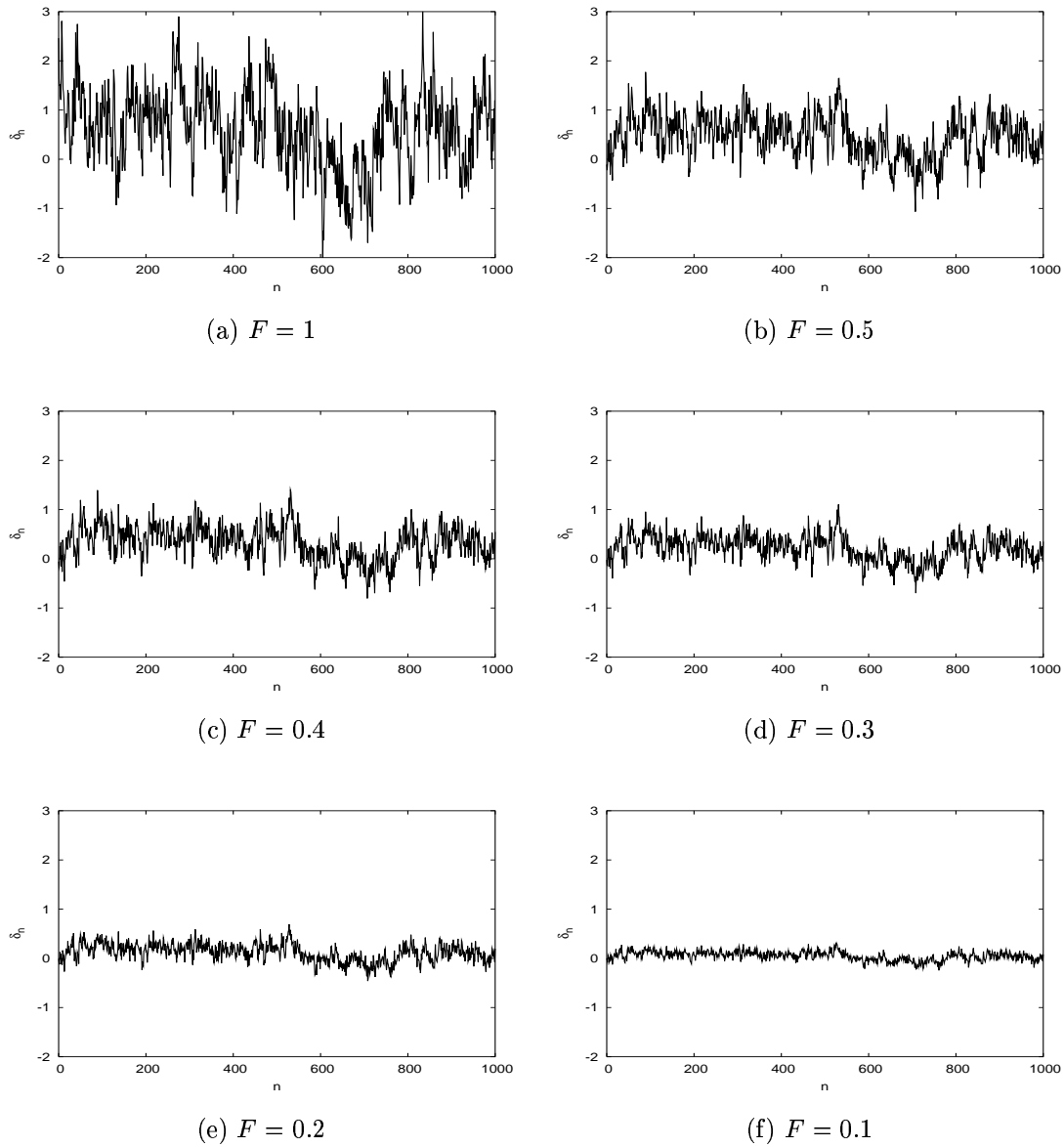


Figura 6.12: Función δ_n para una matriz correspondiente a cada uno de los valores de F que se indican.

F	β
1.0	1.07 ± 0.01
0.5	3.85 ± 0.03
0.4	5.91 ± 0.04
0.3	10.31 ± 0.07
0.2	22.8 ± 0.1
0.1	89.7 ± 0.8

Tabla 6.3: Valores del parámetro de repulsión β para matrices Lanczos con distinto valor de F . El cálculo se ha realizado ajustando por mínimos cuadrados los datos numéricos a la distribución de Izrailev (2.85).

representa el resultado del ajuste por mínimos cuadrados a una ley $P_\omega^\delta \propto \omega^{-\alpha}$; los valores obtenidos para α se presentan en la tabla 6.4. En general, el ajuste a la ley de potencias con $\alpha \approx 1$ es muy bueno para todo valor de α ; sólo a frecuencias altas las desviaciones con respecto a la ley de potencias se hacen mayores al disminuir F .

F	α
1.0	1.07 ± 0.03
0.5	1.00 ± 0.03
0.4	0.99 ± 0.03
0.3	0.98 ± 0.03
0.2	0.98 ± 0.03
0.1	0.98 ± 0.03

Tabla 6.4: Valores del parámetro de α para matrices Lanczos con distinto valor de F . El cálculo se ha realizado ajustando por mínimos cuadrados el espectro de potencias medio a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$.

El ajuste por mínimos cuadrados permite concluir que la ley $P_\omega^\delta \propto \omega^{-\alpha}$ describe correctamente las fluctuaciones de los espectros de matrices Lanczos, lo cual es suficiente para justificar las conclusiones que se detallan a continuación. Sin embargo, en el capítulo 5 se obtuvo una expresión analítica (5.73) aplicable a sistemas caóticos

$$\overline{P_k^\delta} \sim \frac{N}{2\pi^2\beta k}, \quad N \gg 1, \quad 0 < k \leq \tau_0 N, \quad (6.20)$$

que proporciona no solamente el valor $\alpha = 1$, sino también la constante que determina la ordenada en el origen. Dada la relación entre la intensidad de las fluctuaciones F y la repulsión de niveles β , resulta tentador generalizar la ecuación anterior para todo valor de F

$$\overline{P_k^\delta} \sim \frac{NF^2}{2\pi^2k}, \quad N \gg 1, \quad 0 < k \leq \tau_0 N. \quad (6.21)$$

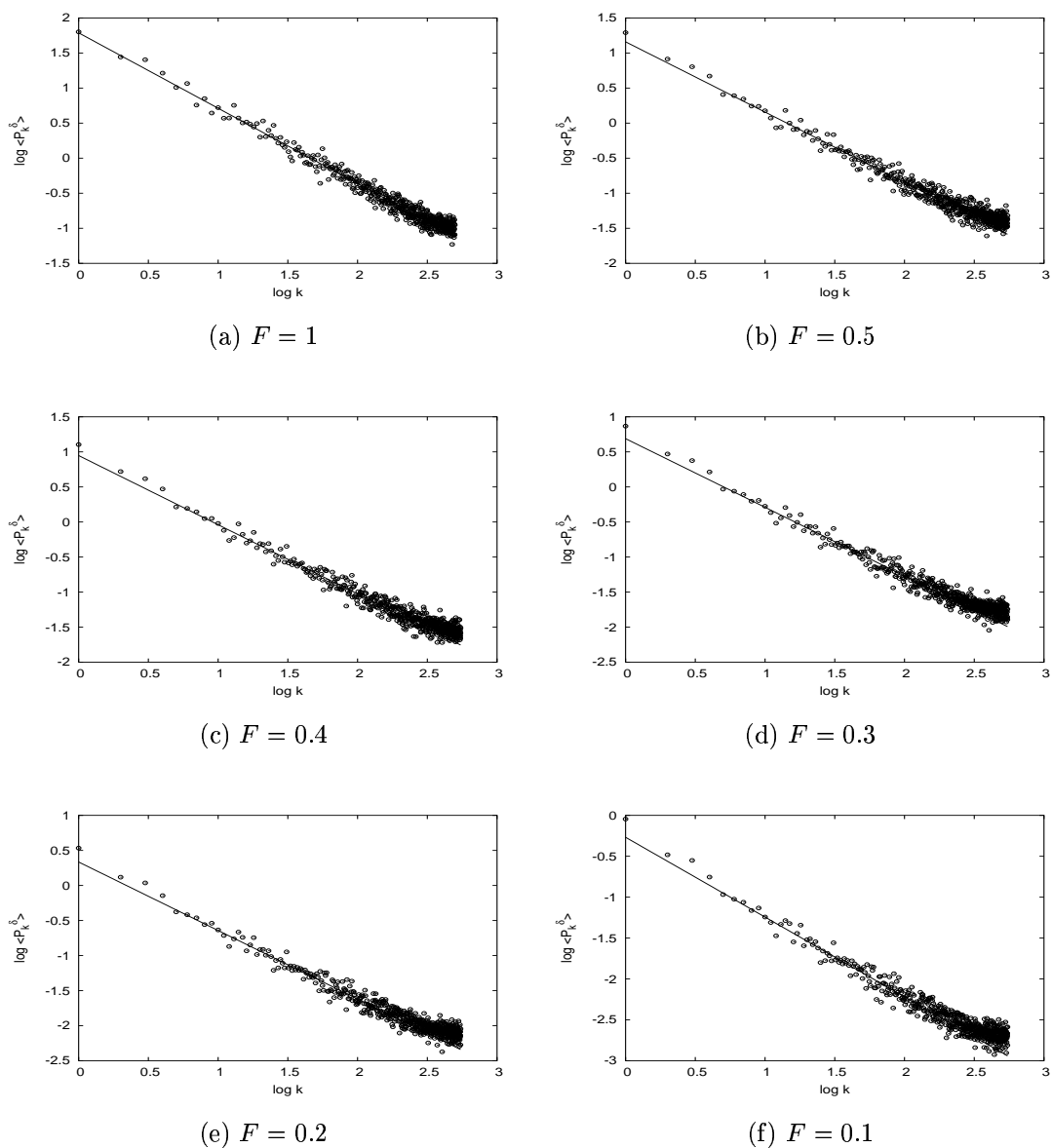


Figura 6.13: Espectro de potencias medio, calculado con 30 matrices, de la función δ_n para matrices Lanczos con los valores F que se indican. La línea continua representa el ajuste por mínimos cuadrados a una ley $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$.

En caso de ser correcta, esta expresión permitiría describir correctamente el espectro de potencias de las fluctuaciones espectrales de las matrices Lanczos sin recurrir a un ajuste por mínimos cuadrados.

F	F_{ef}
1.0	1.10 ± 0.06
0.5	0.53 ± 0.03
0.4	0.419 ± 0.024
0.3	0.311 ± 0.018
0.2	0.205 ± 0.012
0.1	0.103 ± 0.004

Tabla 6.5: Comparación entre el valor real de F y el valor efectivo F_{ef} obtenido ajustando los datos numéricos a (6.21) por mínimos cuadrados.

Para comprobar la validez de (6.21) hemos calculado F_{ef} a partir de esta ecuación en los seis casos que estamos considerando¹³; en la tabla 6.5 se muestran los resultados obtenidos. En todos los casos, salvo en $F = 1$, la intensidad real F y la efectiva F_{ef} coinciden dentro de los márgenes de error; la pequeña desviación cuando $F = 1$ es razonable teniendo en cuenta que para este caso α es ligeramente mayor que la unidad. Estos resultados ponen de manifiesto que la ecuación (6.19) determina con gran precisión la repulsión β , de forma que es aplicable no sólo a la distribución de próximos vecinos, sino también en las correlaciones de largo alcance.

6.3.4. Conclusión general: antipersistencia y repulsión de niveles

Los resultados obtenidos en esta sección permiten generalizar la relación entre repulsión de niveles y antipersistencia formulada en el capítulo 4. De forma concisa, puede decirse que: *la repulsión de niveles se manifiesta en forma de serie temporal antipersistente, de manera que la antipersistencia es máxima para repulsiones iguales o mayores a la de un sistema GOE*. Esta conclusión es muy interesante por dos motivos:

- Confirma el ruido $1/f$ como propiedad característica del caos cuántico. El ruido $1/f$ aparece cuando el sistema es ergódico y se mantiene al incrementar artificialmente la repulsión.

¹³Denotamos F_{ef} para indicar F *efectivo*, es decir, la intensidad efectiva de las fluctuaciones de la matriz Lanczos en función del resultado obtenido para el espectro de potencias.

- Permite postular un mecanismo físico que da origen al ruido $1/f$, tal y como se explica a continuación. Un espectro de niveles puede entenderse como un sistema estático de muchas partículas: cada partícula representa un nivel y el espectro de niveles representa la distribución de dichas partículas en el estado de equilibrio¹⁴. Desde este punto de vista, la repulsión de niveles puede entenderse como una interacción repulsiva entre las partículas, que actúa a larga distancia y cuyo principal efecto es que el grado de desorden del estado de equilibrio disminuye al aumentar la intensidad de la repulsión. El hecho de que el espectro resultante dé lugar a un ruido $1/f$ siempre que $F < 1$ (hasta el límite $F = 0$, en el que desaparecen todas las fluctuaciones y el espectro está completamente ordenado) muestra que el límite de antipersistencia (expresado en el ruido $1/f$) es un límite inferior de desorden a todas las escalas: el ruido $1/f$ puede entenderse como el ruido más ordenado.

No obstante, estas conclusiones han de tomarse con cautela debido a que se han obtenido analizando un único sistema, que, además, no se corresponde con un hamiltoniano físico.

¹⁴Nótese la similitud entre este planteamiento y la interpretación de un hamiltoniano caótico como la distribución de probabilidad (6.11) como solución de una ecuación de Langevin para un cierto tiempo t [87].

Capítulo 7

Conclusiones

7.1. Conclusiones principales del trabajo

Las principales conclusiones y resultados novedosos presentados en esta tesis doctoral son los siguientes:

- El espectro de energías de un sistema cuántico es análogo a una serie temporal en la que la energía desempeña el papel del tiempo. Los métodos estadísticos de análisis de series temporales sirven para estudiar el caos cuántico.
- Las fluctuaciones espectrales de los sistemas cuánticos caóticos constituyen un ruido $1/f$. Las fluctuaciones espectrales de los sistemas cuánticos regulares constituyen un ruido $1/f^2$.
- Los sistemas cuánticos caóticos e integrables forman parte de una clase muy amplia de sistemas complejos que se caracterizan por un ruido $1/f^\alpha$. La repulsión de niveles en el espectro comporta la antipersistencia en la serie temporal análoga.
- Las fluctuaciones espectrales del billar de Robnik, sistema cuántico intermedio (ni caótico ni integrable), constituyen un ruido $1/f^\alpha$, de modo que α es un indicador del grado de caos del sistema. Otros sistemas intermedios no presentan esta característica.
- A partir de la teoría de matrices aleatorias y de la aproximación semiclásica se explica el ruido $1/f$ [$1/f^2$] en sistemas caóticos [integrables]. No es posible explicar en estos términos el comportamiento de los sistemas intermedios.
- El ruido $1/f$ es la manifestación de la repulsión de niveles de una cierta intensidad: caracteriza desde la repulsión correspondiente al GOE hasta el límite de repulsión infinita (espectro equiespaciado).

A continuación se comentan en detalle estas conclusiones.

7.2. Resumen de resultados

El objetivo de esta tesis doctoral es la caracterización del caos cuántico a base de considerar el espectro de energías como una serie temporal. La principal conclusión que hemos obtenido es que las fluctuaciones del espectro de energías de los sistemas caóticos constituyen un ruido $1/f$, mientras que las de los sistemas integrables dan lugar a un ruido $1/f^2$. Lo más novedoso e interesante de este resultado no está, sin embargo, en que ambas dinámicas puedan distinguirse mediante este tipo de análisis; la conclusión fundamental consiste en que las fluctuaciones que caracterizan a los sistemas cuánticos caóticos son ubicuas en la física y en la naturaleza, ya que el ruido $1/f$ es una de las propiedades más habituales en los sistemas complejos de todo tipo. Los resultados de este trabajo permiten, en consecuencia, inscribir el caos cuántico dentro de un conjunto genérico de sistemas complejos.

El estudio de las fluctuaciones del espectro de energías es una herramienta habitual para discernir si un sistema cuántico es caótico o regular. Al contrario de lo que sucede en mecánica clásica, en mecánica cuántica no es posible definir el caos de una manera sencilla, ni axiomática, ni fenomenológicamente. No obstante, la aproximación semiclásica, desarrollada con detalle para hamiltonianos de pocos grados de libertad, establece un vínculo entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica; a partir de ella se puede deducir que las fluctuaciones del espectro de energía, que es una magnitud puramente cuántica, contienen toda la información sobre la dinámica clásica del sistema. En consecuencia, y a pesar de que esta aproximación no está aún bien desarrollada para hamiltonianos con muchos grados de libertad y para sistemas sin un análogo clásico bien definido, el análisis estadístico de las citadas fluctuaciones se considera el modo más fiable de determinar si un sistema cuántico es regular o caótico.

El trabajo realizado en esta tesis doctoral consiste en explotar las similitudes entre un espectro cuántico y una serie temporal para caracterizar la naturaleza de las fluctuaciones del espectro de energías y relacionarlas con las de otros sistemas complejos. Si se establece una analogía entre la energía de un espectro cuántico y el tiempo en el que sucede un determinado fenómeno, puede decirse que cada nivel de energía “ocurre” en una determinada energía E_n , igual que un suceso cualquiera, como un latido cardíaco o el pulso de un reloj atómico, sucede en un cierto tiempo t_n . En esta tesis doctoral hemos tomado como punto de partida esta analogía y a partir de ella hemos caracterizado las fluctuaciones cuánticas mediante una técnica sencilla y muy habitual en el análisis de series temporales: el estudio del espectro de potencias. Hemos investigado el comportamiento de un gran número de sistemas físicos y modelos matemáticos; a partir de todos los resultados hemos obtenidos la

conclusión que hemos comentado al principio de este capítulo.

Hemos comenzado el trabajo estudiando las tres colectividades de matrices aleatorias Gaussianas, GOE, GUE y GSE, que constituyen un modelo universal en la descripción del caos cuántico; además, hemos introducido una cuarta colectividad, el GDE, que describe los sistemas integrables. El principal resultado que hemos obtenido es que las cuatro colectividades se caracterizan por un espectro de potencias autosimilar, que sigue una ley de potencias $P(\omega) \propto \omega^{-\alpha}$; en las colectividades caóticas $\alpha \sim 1$ y en la integrable $\alpha \sim 2$. Este primer resultado constituye un importante vínculo entre un espectro de energías y las señales fluctuantes de otros muchos sistemas complejos, tanto físicos como biológicos, económicos o sociales, ya que la autosimilaridad en el espectro de potencias es una característica de muchos de estos fenómenos. Además, este resultado permite caracterizar el caos cuántico cualitativamente mediante una propiedad muy sencilla: la antipersistencia: se dice que una señal temporal es antipersistente si tiende a corregir las desviaciones estadísticas con respecto a su valor medio; esta propiedad da lugar a un espectro de potencias autosimilar con $1 < \alpha < 2$. Tradicionalmente, los sistemas caóticos se identifican por la repulsión entre niveles energéticos consecutivos: en ellos, si se varía un parámetro libre del hamiltoniano (por ejemplo, el campo magnético) dos niveles energéticos consecutivos nunca se cruzan; en los sistemas integrables no existe tal restricción. El resultado obtenido con las colectividades Gaussianas de matrices aleatorias muestra que esta propiedad se manifiesta en forma de serie temporal muy antipersistente o en el límite de máxima antipersistencia, que se corresponde con $\alpha = 1$. Al ser los resultados prácticamente idénticos en las tres colectividades caóticas, todo parece indicar que la máxima antipersistencia se alcanza a partir de un mínimo de repulsión, la que caracteriza al GOE.

Además de las colectividades Gaussianas GOE, GUE, GSE y GDE, hemos estudiado también colectividades de matrices construidas mediante interacciones aleatorias a k cuerpos EGOE(k). Estas nuevas colectividades se caracterizan porque dan lugar a hamiltonianos caóticos o regulares en función del número de cuerpos de su interacción; para las dimensiones que hemos manejado en este trabajo, sólo las interacciones a un cuerpo dan lugar a hamiltonianos integrables. Desde un punto de vista conceptual, la principal diferencia entre estas colectividades y las Gaussianas está en que las primeras dan lugar a hamiltonianos con mayor significado físico; desde un punto de vista técnico, las interacciones aleatorias producen hamiltonianos con problemas de ergodicidad, más difíciles de analizar estadísticamente. Los resultados que hemos obtenido corroboran las conclusiones alcanzadas con el estudio de las colectividades Gaussianas. Además, hemos comprobado que la falta de ergodicidad no tiene un efecto dramático en las fluctuaciones de los distintos miembros de la colectividad: hemos calculado el valor de α para cada miembro de manera individual y hemos concluido que los resultados se distribuyen alrededor de $\alpha = 1$ en una Gaussiana cuya desviación típica σ disminuye al aumentar el tamaño de la

matriz. El único efecto anómalo (y probablemente espurio) relacionado con la falta de ergodicidad se localiza en las dos o tres frecuencias más bajas del espectro de potencias y no influye en el resultado final.

Todos los resultados obtenidos con los diversos tipos de matrices aleatorias están en la misma línea, pero para obtener conclusiones verdaderamente significativas es necesario estudiar también algunos sistemas físicos, tanto complejos (de muchos grados de libertad) como simples (de pocos grados de libertad). En este trabajo hemos escogido el núcleo atómico ^{24}Mg como representante de los sistemas de muchos grados de libertad, y hemos utilizado el modelo de capas con interacciones realistas para calcular su espectro. A continuación, hemos estudiado las fluctuaciones de diferentes subespectros con distinto momento angular; hemos concluido que en todos los casos éstas son del tipo ruido $1/f$. Además, hemos caracterizado el núcleo como un todo, calculando el espectro de potencias medio para todas las secuencias con independencia de su momento angular; nuevamente hemos obtenido que las fluctuaciones del ^{24}Mg constituyen un ruido $1/f$.

En último lugar en lo que se refiere a la caracterización de las fluctuaciones de los sistemas caóticos e integrables, hemos estudiado dos billares cuánticos, ya que estos sistemas se consideran el paradigma del caos en mecánica cuántica. Como representante de los billares integrables hemos escogido un billar rectangular tal que la razón entre sus lados es irracional. El análisis estadístico de sus fluctuaciones muestra que éstas constituyen un ruido $1/f^2$, pero sólo a frecuencias suficientemente altas; a bajas frecuencias el resultado numérico está por debajo del esperado. El estudio del billar en aproximación semiclásica permite comprender el porqué de estas anomalías: las bajas frecuencias se corresponden con grandes escalas de energía para las cuales, bien no existen, bien existen muy pocas órbitas clásicas periódicas; según la aproximación semiclásica, las fluctuaciones sólo se comportan de manera universal a escalas en las que hay muchas órbitas clásicas periódicas. El estudio de la función δ_n y su espectro de potencias en función de la energía nos ha permitido obtener dos importantes conclusiones. En primer lugar, hemos concluido que a energía suficientemente alta se recupera el comportamiento universal que da lugar a un ruido $1/f^2$. En segundo lugar, nuestros resultados muestran que a baja energía es posible detectar con nitidez la frontera entre la zona universal y la zona de fluctuaciones anómalas; hemos comprobado, incluso, que la función δ_n permite detectar la contribución individual de las órbitas periódicas de bajo periodo. En consecuencia, el estudio de un billar integrable nos ha permitido concluir que la función δ_n no sólo es útil para estudiar el comportamiento universal de las fluctuaciones, sino también para determinar la región en la que se produce éste y los efectos anómalos que se producen fuera de la citada región.

Como representante de los billares caóticos, hemos escogido un billar con forma de estadio, modelado experimentalmente mediante un resonador de microondas. El resultado principal corrobora lo obtenido en los casos anteriores: las fluctuaciones

constituyen un ruido $1/f$, al menos para frecuencias medias y altas; a frecuencias bajas aparecen las mismas desviaciones que en el billar rectangular y se identifican con la misma facilidad que en éste. A pesar de la claridad del resultado, el estudio estadístico de las fluctuaciones de este billar es bastante más complicado que en los casos anteriores: el dispositivo experimental no es capaz de detectar todos los niveles en una determinada ventana de energía, y la única información complementaria que se puede obtener al respecto consiste en determinar, mediante la comparación con ciertos modelos teóricos, entre qué dos niveles aparentemente consecutivos ha de estar cada uno de los niveles perdidos. Este inconveniente nos ha permitido estudiar la sensibilidad de los nuevos estadísticos a este tipo de problemas. El resultado obtenido nos permite concluir que tanto la propia función δ_n como el ajuste de su espectro de potencias a una ley $P(\omega) \propto \omega^{-\alpha}$ son robustos ante defectos, perturbaciones o pequeñas anomalías en el sistema experimental. Desde un punto de vista práctico, esta conclusión es de gran importancia, pues da vía libre a la aplicación de estas técnicas en la mayoría de los dispositivos experimentales.

Una vez formulada y contrastada la conclusión principal de esta tesis doctoral, hemos procedido a estudiar el mismo problema desde un punto de vista teórico. En el caso de los sistemas integrables, el estudio es bastante sencillo, ya que las propiedades estadísticas del espectro de energía son las de una secuencia de variables aleatorias independientes. El cálculo del espectro de potencias de la función δ_n para este tipo de secuencias corrobora que los sistemas integrables se caracterizan por un ruido $1/f^2$, al menos para frecuencias medias; a frecuencias bajas pueden aparecer efectos anómalos debido a las órbitas periódicas de periodo más bajo, y a altas frecuencias el resultado teórico se desvía de la ley de potencias. Hemos utilizado un billar rectangular a muy alta energía para contrastar la fórmula teórica (en la que no se tienen en cuenta los efectos asociados a las órbitas de pequeño periodo) y el acuerdo es excelente en todo el rango de frecuencias: la expresión teórica reproduce con exactitud la región autosimilar y las desviaciones a altas frecuencias. Igualmente, hemos utilizado la colectividad GDE para comprobar los resultados en un sistema libre de efectos anómalos a baja frecuencia; los resultados corroboran que la teoría que hemos desarrollado es correcta.

El cálculo teórico del espectro de potencias de la función δ_n para un sistema caótico es mucho más complicado; las correlaciones entre los niveles, producidas por la repulsión y que dan lugar a la antipersistencia, lo dificultan sobremanera. En esta tesis doctoral hemos utilizado la teoría de matrices aleatorias como base para llevar a cabo dicho cálculo; asimismo, hemos comprobado que esta teoría coincide con la aproximación semiclásica a escalas en las que las fluctuaciones son universales. Para contrastar estas expresiones, hemos utilizado en primer lugar las tres colectividades de matrices aleatorias GOE, GUE y GSE. Los resultados obtenidos muestran que las aproximaciones realizadas en el cálculo son correctas para las colectividades GOE y GUE; en ambos casos la expresión teórica reproduce con gran exactitud el resultado

numérico en todo el rango de frecuencias. Por el contrario, el resultado obtenido con la colectividad GSE no es tan satisfactorio, ya que la descripción teórica sólo es buena a bajas frecuencias; la razón de este resultado estriba en que la aproximación $K(\tau) = 1$, $\tau \geq 1$ no es aplicable a esta colectividad. Hemos utilizado también el núcleo ^{34}Na y la realización experimental del billar de Sinai para comprobar que los resultados teóricos son aplicables a sistemas físicos, que pueden adolecer de efectos anómalos en determinados rangos de frecuencias. En el caso del ^{34}Na el acuerdo es excelente: la expresión teórica reproduce los resultados numéricos a lo largo de todo el rango de frecuencias. Por el contrario, el resultado para el billar de Sinai no es tan bueno, ya que la descripción teórica no reproduce muy bien el resultado numérico, ni para bajas frecuencias, debido a los efectos anómalos relacionados con las órbitas periódicas más cortas, ni para las altas frecuencias; a pesar de ello, el resultado puede considerarse muy satisfactorio si se tienen en cuenta todos los problemas que presentan estos espectros. Además, hemos comprobado que las expresiones teóricas para todas las colectividades se reducen a un ruido $1/f$ si se consideran solamente los términos de primer orden; así pues, hemos demostrado la conjetura formulada en el capítulo 4 para el rango de frecuencias medias. En resumen, tomando como base la teoría de matrices aleatorias, hemos logrado calcular teóricamente una ley para el espectro de potencias de la función δ_n para sistemas cuánticos caóticos en el rango universal de fluctuaciones. Este resultado es muy importante desde una perspectiva más amplia, ya que existen muy pocos modelos físicos para los cuales se ha demostrado teóricamente que sus fluctuaciones constituyen un ruido $1/f$.

Para completar la caracterización del caos cuántico mediante series temporales, hemos estudiado también sistemas intermedios entre regularidad y caos. A pesar de que en mecánica clásica existe una teoría general para esta transición, al menos cerca del régimen de integrabilidad, en mecánica cuántica no se ha hallado ninguna propiedad universal que caracterice este tipo de sistemas. Con el fin de determinar si el punto de vista adoptado en esta tesis doctoral permite encontrar algún comportamiento universal en la mecánica cuántica del régimen intermedio hemos estudiado un sistema físico y un modelo matemático.

Como sistema físico representativo de la transición hemos elegido el billar de Robnik, que designa de forma genérica la familia de billares de limaçon. El billar de Robnik es especialmente interesante porque cerca de la integrabilidad se comporta como un sistema KAM, es decir, sus propiedades clásicas son universales. Los resultados obtenidos muestran que en este sistema la transición entre regularidad y caos se manifiesta en las fluctuaciones del espectro de energías en forma de un espectro de potencias autosimilar, caracterizado por un exponente α que transita suavemente desde $\alpha = 2$ hasta $\alpha = 1$; es posible, por lo tanto, concluir que la aparición del caos se manifiesta en un incremento de la antipersistencia, que se hace máxima al alcanzar el límite caótico. Este resultado es contradictorio con una de las teorías más aceptadas a la hora de describir en aproximación semiclásica la mecánica cuántica.

tica de los sistemas intermedios: el PUSC (véase capítulo 6), que establece que las regiones caótica y regular del espacio de fases dan lugar a subespectros cuánticos independientes, que se superponen sin correlación para componer el espectro total del sistema. El resultado que hemos obtenido muestra que, al menos a energía suficientemente baja, ha de haber alguna correlación entre los subespectros regulares y caóticos. Queda para futuros trabajos determinar qué clase de correlación produce una ley de potencias con $1 < \alpha < 2$ en el espectro de potencias: si es una ley muy específica la conclusión sería que el billar de Robnik es un caso muy especial; en caso contrario, podría concluirse que el ruido $1/f^\alpha$ es característico de sistemas caóticos, integrables y una buena parte de los que no son ni una cosa ni la otra. Esta última posibilidad sería muy interesante, pues haría del caos cuántico un modelo físico para series temporales en todo el rango de antipersistencia, de forma que la intensidad de ésta determinaría el nivel de caos.

Como modelo teórico hemos escogido una colectividad de matrices Gaussianas: el DGOE, que interpola entre la regularidad y el caos. En este caso, los resultados obtenidos son concluyentes como en el billar de Robnik, pero en un sentido diferente: en los casos intermedios, las fluctuaciones del espectro de energías no dan lugar a un ruido $1/f^\alpha$. Además, hemos realizado un análisis de escala para comprobar la influencia del tamaño de la matriz en los resultados; los resultados nos inducen a pensar que en el límite de dimensión infinita la transición entre regularidad y caos se produce de forma brusca, sin estados intermedios. Hemos concluido, en consecuencia, que la colectividad DGOE no es un buen modelo para estudiar la transición entre regularidad y caos, porque no parece reproducir la rica fenomenología observada en el billar de Robnik. Así pues, la pregunta sobre la presencia de los ruidos $1/f^\alpha$ en los sistemas intermedios sigue en el aire.

Por último, hemos estudiado la transición entre un sistema caótico, representado por la colectividad GOE, y un espectro que localmente se comporta como el de un oscilador armónico, ya que no presenta fluctuaciones espectrales. La base para este estudio está en la existencia de una forma canónica tridiagonal para todo hamiltoniano cuántico tal que las fluctuaciones de los elementos de matriz en esa representación determinan la intensidad de la repulsión de niveles. En este trabajo hemos partido de la forma canónica de un hamiltoniano GOE y hemos alcanzado un espectro de oscilador a base de disminuir estas fluctuaciones hasta hacerlas nulas. Antes de estudiar la función δ_n hemos caracterizado la intensidad de la repulsión de niveles en cada estadio de la transición ajustando el estadístico $P(s)$ a una expresión fenomenológica que incluye la intensidad de la repulsión como parámetro libre. El resultado obtenido con la función δ_n muestra que el aumento de la repulsión de niveles no cambia la naturaleza de las fluctuaciones espectrales: en todos los casos estudiados, hasta una repulsión 90 veces superior a la de un GOE, hemos obtenido un ruido $1/f$. La principal conclusión que dimana de este resultado es que la repulsión de niveles es la responsable de la antipersistencia en los espectros cuánticos, y

que la máxima antipersistencia ($\alpha = 1$) es una especie de barrera que no se puede cruzar a base de aumentar la repulsión; matemáticamente, este resultado se puede expresar: $\lim_{\beta \rightarrow \infty} \alpha = 1$. Esta conclusión es muy interesante porque completa la analogía entre un espectro de energías cuántico y una serie temporal que sirvió como punto de partida para todo este trabajo.

Apéndice A

Teoría de matrices aleatorias

En la sección 2.3.4 de la tesis doctoral se introdujo la teoría de matrices aleatorias (RMT) como modelo para la descripción de las fluctuaciones del espectro de energía de los sistemas cuánticos caóticos. En este apéndice incluimos algunos detalles técnicos que se obviaron entonces para facilitar la lectura.

A.1. Colectividades Gaussianas

Como ya se dijo en la sección 2.3.4, la RMT se creó para describir de forma estadística los espectros de los núcleos atómicos pesados. La distinción en tres colectividades (GOE, GUE y GSE) se fundamenta en las tres clases de universalidad que existen dentro de la ecuación de Schrödinger clásica [35] y que se manifiestan en las propiedades fundamentales de simetría del problema. Los hamiltonianos que poseen simetría bajo inversión temporal y simetría bajo rotaciones pueden representarse por matrices reales simétricas invariantes bajo el grupo de transformaciones ortogonales; el mismo tipo de matrices sirve para representar a los sistemas con simetría bajo inversión temporal y espín entero en los que la invariación bajo rotaciones no se cumple. Los hamiltonianos con simetría bajo inversión temporal con espín semientero en los que la simetría bajo rotaciones no se verifica pueden representarse mediante matrices cuaterniónicas hermíticas autoduales invariantes bajo el grupo de transformaciones simplécticas. Y los hamiltonianos sin simetría bajo rotaciones pueden representarse por matrices hermíticas invariantes bajo transformaciones unitarias.

A.2. Funciones de correlación

A partir de la distribución de probabilidad para los autovalores (2.67)

$$P_N(E_1, \dots, E_N) \propto \prod_{n>m} |E_n - E_m|^\nu \exp\left(-A \sum_n E_n^2\right), \quad (\text{A.1})$$

se define la función de correlación a n puntos

$$R_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{N!}{(N-n)!} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n+1} \dots dx_N P_N(x_1, \dots, x_N), \quad (\text{A.2})$$

que representa la probabilidad de encontrar un nivel entorno a $x_1, x_2 \dots x_n$, con independencia de la posición del resto de los niveles¹. Casi todos los estadísticos espectrales se obtienen a partir de esta magnitud.

A.3. Estadísticos espectrales

La función de correlación a n puntos sirve como base para calcular los estadísticos espectrales habituales. En esta sección presentamos los resultados para los estadísticos más utilizados en la medición de las correlaciones de corto y largo alcance. El lector interesado en más detalles, así como en la deducción los citados estadísticos a partir de la función de correlación a n puntos, puede consultar [37].

A.3.1. Correlaciones de corto alcance

El estadístico habitual para la medición de las correlaciones de corto alcance es la distribución de espaciamientos de próximos vecinos $P(s)$. Este estadístico se calcula a partir de la probabilidad de encontrar varios niveles consecutivos en un intervalo fijo

$$A(\theta; x_1, \dots, x_n) = \frac{N!}{n!(N-n)!} \int \dots \int dx_{n+1} \dots dx_N P_N(x_1, \dots, x_N), \quad (\text{A.3})$$

donde la integración se realiza fuera del intervalo $(-\theta, \theta)$ y $|x_j| \leq \theta$, $j = n+1, \dots, N$; el resto de las variables se encuentran en el interior de dicho intervalo.

A partir de esta magnitud se define la probabilidad de encontrar exactamente n niveles en un intervalo $s = 2\theta$ $E(n; s)$

$$E(n; s) = \int_{-\theta}^{\theta} \dots \int_{-\theta}^{\theta} dx_1 \dots dx_n \lim_{N \rightarrow \infty} A(\theta; x_1, \dots, x_n). \quad (\text{A.4})$$

¹Nótese que $R_1(x)$ coincide con la densidad de estados.

La distribución de espaciamentos de próximos vecinos se calcula a partir de $E(0; s)$, es decir, de la probabilidad de no encontrar ningún nivel en un intervalo de longitud s según

$$P(s) = -\frac{d^2}{ds^2}E(0; s). \quad (\text{A.5})$$

En el caso del GDE, esta magnitud puede calcularse analíticamente; el resultado es

$$P(s) = \exp(-s). \quad (\text{A.6})$$

Para el resto de las colectividades, el cálculo y el resultado para matrices de dimensión N es muy complejo; por esa razón suele utilizarse en su lugar la conjetura de Wigner, obtenida para matrices de dimensión $N = 2$, y que resulta una aproximación excelente. Los resultados para cada una de las colectividades son:

$$P(s) = \frac{\pi}{2}s \exp\left(-\frac{\pi}{4}s^2\right) \quad (\text{A.7})$$

para el GOE;

$$P(s) = \frac{32}{\pi^2}s^2 \exp\left(-\frac{4}{\pi}s^2\right) \quad (\text{A.8})$$

para el GUE; y

$$P(s) = \frac{2^{18}}{3^6\pi^3}s^4 \exp\left(-\frac{64}{9\pi}s^2\right) \quad (\text{A.9})$$

para el GSE.

Estas tres expresiones ponen de manifiesto que la repulsión es diferente en las distintas colectividades, $\beta = 1$ para GOE, $\beta = 2$ para GUE y $\beta = 4$ para GSE. No existen colectividades de matrices aleatorias que den lugar a repulsiones más intensas².

A.3.2. Correlaciones de largo alcance

Los estadísticos más interesantes para la medición de correlaciones de largo alcance son el factor de forma $K(\tau)$ y la función $\Delta_3(L)$. Para el cálculo de ambas magnitudes conviene definir la siguiente función

$$Y_2(r) = 1 - R_2(r), \quad (\text{A.10})$$

²Las matrices de Lanczos estudiadas en la sección 6.3 no pueden considerarse una colectividad en el mismo sentido que las que se presentan en este apéndice.

donde $r = E_2 - E_1$ y $R_2(r) = R_2(E_1, E_2)$. La expresión matemática de $Y_2(r)$ se conoce para las tres colectividades clásicas de matrices aleatorias:

$$Y_2(r) = \left(\frac{\sin(\pi r)}{\pi r} \right)^2 + \left[\int_r^\infty dt \frac{\sin(\pi t)}{\pi t} \right] \left[\frac{d}{dr} \frac{\sin(\pi r)}{\pi r} \right], \quad (\text{A.11})$$

para el GOE;

$$Y_2(r) = \left(\frac{\sin(\pi r)}{\pi r} \right)^2, \quad (\text{A.12})$$

para el GUE; y

$$Y_2(r) = \left(\frac{\sin(2\pi r)}{2\pi r} \right)^2 - \frac{d}{dr} \frac{\sin(2\pi r)}{2\pi r} \int_0^r dt \frac{\sin(2\pi t)}{2\pi t}, \quad (\text{A.13})$$

para el GSE. En el caso de los sistemas integrables $Y_2(r) = 0$.

Factor de forma

El factor de forma $K(\tau)$ no es un estadístico muy utilizado para la medición de las correlaciones de largo alcance, pero es una magnitud fundamental en el cálculo teórico de P_k^δ . El factor de forma se obtiene a partir de $Y_2(r)$ según

$$K(\tau) = 1 - b(\tau), \quad (\text{A.14})$$

donde $b(\tau)$ es la transformada de Fourier de $Y_2(r)$.

$$b(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} dr Y_2(r) \exp(2\pi ikr). \quad (\text{A.15})$$

Las expresiones para las distintas colectividades de RMT son las siguientes:

$$K(\tau) = \begin{cases} 2|\tau| - |\tau| \ln(1 + 2|\tau|) & |\tau| \leq 1 \\ 1 - |\tau| \left(\frac{2|\tau| + 1}{2|\tau| - 1} \right) & |\tau| > 1, \end{cases} \quad (\text{A.16})$$

para el GOE;

$$K(\tau) = \begin{cases} |\tau| & |\tau| \leq 1 \\ 1 & |\tau| > 1, \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

para el GUE; y

$$K(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{2}|\tau| + \frac{1}{4}|\tau| \log|1 - |\tau|| & |\tau| \leq 2 \\ 1 & |\tau| > 2, \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

para el GSE. En los sistemas integrables $K(\tau) = 1 \forall \tau$.

Estadístico Δ_3

Las correlaciones de largo alcance se estudian habitualmente mediante el estadístico $\Delta_3(L)$. Al igual que el factor de forma, este estadístico se puede calcular directamente a partir de la función $Y_2(r)$, según:

$$\Delta_3(L) = \frac{L}{15} - \frac{1}{15L^4} \int_0^L dr (L-r)^3 (2L^2 - 9Lr - 3r^2) Y_2(r). \quad (\text{A.19})$$

El cálculo de este estadístico es bastante complicado. En el caso de sistemas integrables se conoce su valor exacto:

$$\Delta_3(L) = \frac{L}{15}, \quad (\text{A.20})$$

mientras que para las colectividades de RMT sólo se conoce su desarrollo asintótico. Los resultados para estas colectividades son:

$$\Delta_3(L) = \frac{1}{\pi^2} \left(\log(2\pi L) + \gamma - \frac{5}{4} - \frac{\pi^2}{8} \right) + \mathcal{O}(L^{-1}) \quad (\text{A.21})$$

para el GOE;

$$\Delta_3(L) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\log(2\pi L) + \gamma - \frac{5}{4} \right) + \mathcal{O}(L^{-1}) \quad (\text{A.22})$$

para el GUE; y

$$\Delta_3(L) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\log(2\pi L) + \gamma - \frac{5}{4} + \frac{\pi^2}{8} \right) + \mathcal{O}(L^{-1}) \quad (\text{A.23})$$

para el GSE.

Apéndice B

Transformada de Fourier

La transformada de Fourier es la herramienta de cálculo más utilizada a lo largo de la presente tesis doctoral. En este apéndice resumimos su base conceptual, así como todo tipo de detalles técnicos relativos a su cálculo, desde su aplicación a procesos estocásticos a su implementación computacional mediante un algoritmo FFT¹.

B.1. Definición de la transformada de Fourier

Dada una función $f(x)$ con valores reales o complejos, se define su transformada de Fourier como

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \exp(-i\omega x), \quad (\text{B.1})$$

de modo que $F(\omega)$ está bien definida si la función original $f(x)$ verifica

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)| < \infty. \quad (\text{B.2})$$

La transformación inversa, que permite recuperar $f(x)$ a partir de $F(k)$, es²

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F(\omega) \exp(i\omega x). \quad (\text{B.3})$$

En mayor parte de esta tesis doctoral, la transformada de Fourier no se aplica a funciones $f(x)$ continuas, sino a series temporales $\{x_i\}$ discretas y finitas. Para

¹Del inglés *Fast Fourier Transform*.

²El factor $\frac{1}{2\pi}$ se incluye a veces en la definición de $F(k)$ o se reparte entre la transformada directa y la inversa mediante sendos factores $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Estas tres definiciones son básicamente equivalentes.

este tipo de casos existe una versión discreta de la transformada de Fourier definida según

$$\hat{x}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q=0}^{N-1} x_q \exp\left(-\frac{2\pi i k q}{N}\right), \quad (\text{B.4})$$

donde N es el tamaño de la serie y $k \in \{0, \dots, N-1\}$ ($k = N$ produce el mismo resultado que $k = 0$); se está suponiendo, además, que $q \in \{0, \dots, N-1\}$, es decir que la serie de longitud N tiene N valores. La transformada inversa se define

$$x_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{x}_k \exp\left(\frac{2\pi i k q}{N}\right), \quad (\text{B.5})$$

donde $q \in \{0, \dots, N-1\}$.

B.1.1. Aplicación a procesos estocásticos

La transformada de Fourier continua está definida originalmente para funciones de módulo integrable, es decir, que verifican la ecuación (B.2). En el caso de que la función $f(x)$ a transformar sea no integrable pero periódica (por ejemplo $f(x) = \cos(x)$), es posible definir una serie de Fourier que describe la función original en función de un conjunto numerable de frecuencias f_k (denominado espectro de la función) según

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} f_k \exp\left(\frac{i\pi k x}{L}\right), \quad (\text{B.6})$$

donde L es el periodo y

$$f_k = \frac{1}{L} \int_0^{2L} dx f(x) \exp\left(-\frac{i\pi k x}{L}\right). \quad (\text{B.7})$$

Esta definición también es aplicable a funciones continuas de soporte compacto [93]

Las dos posibilidades que se acaban de comentar (función de módulo integrable y función periódica) son suficientes para cubrir un amplio rango de problemas; además, en la mayoría de los análisis de datos se trabaja con series discretas, que son siempre de módulo integrable y pueden tratarse como periódicas. Sin embargo, hay ciertas funciones sencillas, como $f(x) = \cos(\sqrt{2x})$, que no son periódicas ni integrables. Para abarcar este tipo de funciones hay que utilizar una extensión del análisis de Fourier

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dZ(\omega) e^{i\omega x}, \quad (\text{B.8})$$

donde $\omega = 2\pi k/N$. $dZ(\omega)$ es

$$dZ(\omega) = \begin{cases} A_k & \omega = \omega_k, k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

para una función periódica;

$$dZ(\omega) = \rho(\omega)d\omega \quad (\text{B.10})$$

para una función no periódica integrable; y

$$dZ(\omega) = O(\sqrt{d\omega}) \quad (\text{B.11})$$

para una función no periódica y no integrable³.

Esta generalización permite aplicar el análisis de Fourier a casi cualquier función. Un ejemplo un poco peculiar lo constituyen los procesos estocásticos, que en general no son ni periódicos ni de módulo integrable, y que están determinados mediante distribuciones de probabilidad; en ellos $dZ(\omega)$ (o directamente $Z(\omega)$) es una variable aleatoria. Dada la complejidad de $Z(\omega)$, una forma mucho más práctica de caracterizar la transformada de Fourier de los procesos estocásticos es mediante el espectro de potencias, que en este caso se define⁴

$$q(\omega) = \frac{|dZ(\omega)|^2}{d\omega}. \quad (\text{B.12})$$

A partir de estas definiciones, el cálculo del espectro de potencias de un proceso estocástico puede realizarse de manera sencilla. Considérese un proceso $f(t)$, definido en principio para $t \in (-\infty, \infty)$ y, por lo tanto, no integrable⁵. Una realización concreta de dicho proceso tiene una longitud finita, de manera que puede definirse a partir de ella un nuevo proceso $f_T(t)$ según

$$f_T(t) = \begin{cases} f(t) & -T \leq t \leq T \\ 0 & |t| > T. \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

³El objeto $O(\sqrt{d\omega})$ es demasiado complejo como para describirlo aquí en detalle. Nótese, no obstante, la relación entre $\sqrt{d\omega}$ y el *periodo* irracional del ejemplo propuesto de función no periódica y no integrable.

⁴Nótese, por ejemplo, que para una señal no periódica pero integrable $dZ(\omega) = \rho(\omega)d\omega$ y, por lo tanto, $q(\omega) = |\rho(\omega)|^2 d\omega$.

⁵Una función cualquiera $X(t)$ definida en todo el intervalo $t \in (-\infty, \infty)$ puede ser integrable; para ello se requiere que esté bien definida en todo el intervalo y que decaiga lo suficientemente deprisa en los límites $t \rightarrow \pm\infty$. Al hablar de procesos estocásticos no se considera esta posibilidad porque se suele suponer que sus propiedades estadísticas no varían tan dramáticamente con el tiempo.

Este nuevo proceso resultante es integrable, de modo que podemos aplicar sobre él el análisis de Fourier clásico y obtener así su espectro de frecuencias

$$f_T(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F_T(\omega) e^{i\omega t}; \quad (\text{B.14})$$

$$F_T(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt f_T(t) e^{-i\omega t} = \frac{1}{2\pi} \int_{-T}^T dt f(t) e^{-i\omega t}. \quad (\text{B.15})$$

Una vez definido el espectro $F_T(\omega)$, el siguiente paso es extender su definición para $t \rightarrow \infty$. Esta extensión no puede realizarse tomando simplemente $\lim_{T \rightarrow \infty} F_T(\omega)$, ya que el proceso es no integrable y, en consecuencia, $F_T(\omega) \rightarrow dZ(\omega)$. Sin embargo, el hecho de que esta última magnitud sea $O(\sqrt{dZ})$ para funciones no integrables permite definir

$$q(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{|F_T(\omega)|^2}{2T}, \quad (\text{B.16})$$

que coincide con la definición de $q(\omega)$ introducida con anterioridad.

En consecuencia, el espectro de potencias de una serie discreta considerada como una realización finita de un proceso estocástico infinito puede calcularse de forma sencilla a partir de una realización. Si se dispone de varias realizaciones, el espectro de potencias del proceso queda caracterizado por

$$P(\omega) = \langle q(\omega) \rangle, \quad (\text{B.17})$$

que, formalmente, es

$$P(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \left\langle \frac{|F_T(\omega)|^2}{2T} \right\rangle. \quad (\text{B.18})$$

El objeto $P(\omega)$ es el que define al proceso estocástico y el que hay que tratar de determinar en la medida de lo posible.

B.1.2. Procedimientos de cálculo

En general, el cálculo de la transformada de Fourier de una serie temporal se realiza mediante la ecuación (B.4), es decir, utilizando la transformada de Fourier discreta. La implementación de dicha (B.4) en un ordenador es bastante sencilla. Si se considera la secuencia $\{x_j\}$ como un vector de N componentes, la transformada $\{\hat{x}_k\}$ queda determinada por otro vector de N componentes

$$\hat{x} = Mx, \quad (\text{B.19})$$

donde M es una matriz cuyas componentes son

$$M_{jk} = \exp\left(\frac{2\pi ijk}{N}\right). \quad (\text{B.20})$$

El cálculo de producto Mx es muy sencillo, pero requiere $\mathcal{O}(N^2)$ operaciones; el tiempo de computación necesario crece demasiado deprisa con el tamaño de la serie temporal. Cuando la dimensión de la matriz M es una potencia de dos es posible simplificar el proceso de cálculo haciendo uso de ciertas propiedades de simetría de M : el cálculo de la transformada de Fourier de una serie de tamaño N puede efectuarse mediante el cálculo de dos transformadas de longitud $N/2$ más N adiciones y sustracciones; este proceso puede repetirse iterativamente todo lo necesario. El algoritmo que lleva a cabo este proceso se conoce con el nombre de FFT⁶ y es el que se utiliza en la mayor parte de la presente tesis doctoral. El desarrollo de versiones más generales de este algoritmo permite, además, relajar la condición $N = 2^d$, lo que hace posible calcular la transformada de Fourier discreta de casi cualquier serie temporal con una eficacia computacional elevada. En esta tesis doctoral se ha utilizado un algoritmo aplicable a series de tamaño N tal que su factor primo más grande sea menor o igual que 19 y no contenga más de 20 factores primos incluyendo repeticiones [61].

A pesar del desarrollo de los algoritmos FFT, en algunas ocasiones no es posible utilizarlos; esto ocurre, por ejemplo, cuando la serie original no es de la forma $\{x_i\}$, $i = 1, \dots, N$, sino que no está uniformemente muestreada x_{i_1}, \dots, x_{i_N} , donde $i_1 < \dots < i_N$ y $i_j \in (1, \dots, M)$, $M \leq N \forall j$. Cuando esto sucede no queda más remedio que generalizar la ecuación (B.4)

$$\hat{x}_k = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{j=0}^{M-1} x_{n_j} \exp\left(\frac{2\pi i k n_j}{N}\right), \quad (\text{B.21})$$

o bien utilizar algoritmos análogos a la FFT diseñados para tal efecto [94]. En la presente tesis doctoral hemos recurrido a (B.21) en tales ocasiones.

B.1.3. Muestreo y transformada de Fourier

En las secciones anteriores se han definido la transformada de Fourier continua (B.1) y su versión discreta (B.4) como objetos que se aplican a situaciones diferentes. Todos los cálculos numéricos presentados en esta tesis doctoral se han realizado mediante la versión discreta, ya que siempre se ha tratado con series finitas y de naturaleza discreta; sin embargo, como se explica en el capítulo 5, es necesario recurrir a la versión continua para formalizar una teoría que explique dichos resultados numéricos. En esta sección se presentan las herramientas necesarias para pasar de la transformada de Fourier continua a la transformada de Fourier discreta; también se demuestra la relación fundamental que hay entre ambas.

Considérese una serie continua $x(t)$, cuya transformada de Fourier es $\hat{x}(\omega)$, y que se muestrea a intervalos regulares dando lugar a una serie discreta $x_n = x(t = n)$.

⁶Del inglés *Fast Fourier Transform*.

Como, en general, la función $x(t)$ tiene soporte infinito, la serie x_n resultante del muestreo ha de ser también infinita, de forma que su transformada de Fourier no se reduce a un conjunto discreto de frecuencias ω_k sino que es una función continua

$$\hat{x}(\omega) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} x(n) \exp(-i\omega n), \quad (\text{B.22})$$

donde $\omega \in (-\pi, \pi)$. En este caso, la transformada inversa es

$$x_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\omega \hat{x}(\omega) \exp(i\omega n). \quad (\text{B.23})$$

A partir de estas expresiones es posible obtener el espectro de Fourier de la serie muestreada a partir del de la función continua. La función $x(t)$ puede escribirse en términos de $\hat{x}(\omega)$ según

$$x(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \hat{x}(\omega) \exp(i\omega t). \quad (\text{B.24})$$

Con el fin de que los límites de las integrales sean finitos, como en (B.23), la ecuación anterior puede descomponerse en una suma infinita

$$x(t) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{(2m-1)\pi}^{(2m+1)\pi} d\omega \hat{x}(\omega) \exp(i\omega t). \quad (\text{B.25})$$

Si ahora se sustituye $\omega \rightarrow \omega' + m\Omega$, donde $\Omega = 2\pi$, el resultado es

$$x(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\Omega}{2}}^{\frac{\Omega}{2}} d\omega' \exp(i\omega' t) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{x}(i\omega' + im\Omega) \exp(i\Omega m t). \quad (\text{B.26})$$

El último paso para relacionar esta ecuación con (B.23) consiste en muestrear el tiempo $x_n = x(t = n)$. Realizando este muestreo, simplificando el resultado anterior y denotando $\omega' = \omega$ se obtiene

$$x_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\omega \exp(i\omega n) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{x}[i(\omega + 2\pi m)]. \quad (\text{B.27})$$

Este resultado se puede aplicar a una serie discreta y finita, de forma que

$$\hat{x}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q=0}^{N-1} \hat{x} \left(\frac{k}{N} + q \right). \quad (\text{B.28})$$

Así pues, la relación entre la transformada de Fourier continua y la transformada de Fourier discreta no es trivial. Los términos en $q \neq 0$ reproducen información correspondiente a $|\omega| > \pi$ en el intervalo de definición de \hat{x}_k , lo cual provoca que la transformada de la serie discreta sea diferente a la transformada continua en el intervalo equivalente a $k = 0, \dots, N - 1$ ⁷.

B.1.4. El teorema de la diferenciación

El cálculo de la transformada de Fourier no sólo sirve como método para estudiar numéricamente las correlaciones en una serie temporal, sino que es también una herramienta útil para realizar determinados cálculos; por esa razón, resulta muy conveniente conocer cómo se manifiestan en el dominio de las frecuencias determinadas operaciones realizadas en el dominio del tiempo o del espacio. En esta sección enunciamos el teorema de la diferenciación, que establece cómo se manifiesta la derivación con respecto al tiempo en el dominio de las frecuencias; asimismo enunciamos el teorema de la integración, correspondiente a la operación inversa.

Considérese una función $f(x)$ escrita en función de su transformada de Fourier $F(\omega)$. La derivada de $f(x)$ se escribe

$$\frac{d}{dx}f(x) = \frac{d}{dx} \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\omega F(\omega) \exp(i\omega x) \right]. \quad (\text{B.29})$$

Si tanto $f(x)$ como su derivada son transformables de Fourier, la expresión anterior se reduce a:

$$\frac{d}{dx}f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F(\omega) \left(\frac{d}{dx} \exp(i\omega x) \right) = i\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F(\omega) \exp(i\omega x). \quad (\text{B.30})$$

En consecuencia, la operación derivación en el dominio temporal se corresponde con una multiplicación por $i\omega$ en el dominio de las frecuencias.

$$\frac{d}{dx}f(x) \leftrightarrow i\omega F(\omega). \quad (\text{B.31})$$

De una manera análoga se puede probar que

$$\int dx f(x) \leftrightarrow -\frac{iF(\omega)}{\omega}. \quad (\text{B.32})$$

⁷Los términos $q \neq 0$ reciben en inglés el nombre de *aliasing*, porque hacen una especie de alias de lo que ocurre para $|\omega| > \pi$ en el intervalo $k = 0, \dots, N - 1$. Dada la dificultad en la traducción del término, en la presente tesis doctoral no nos referiremos a ellos con ningún nombre concreto.

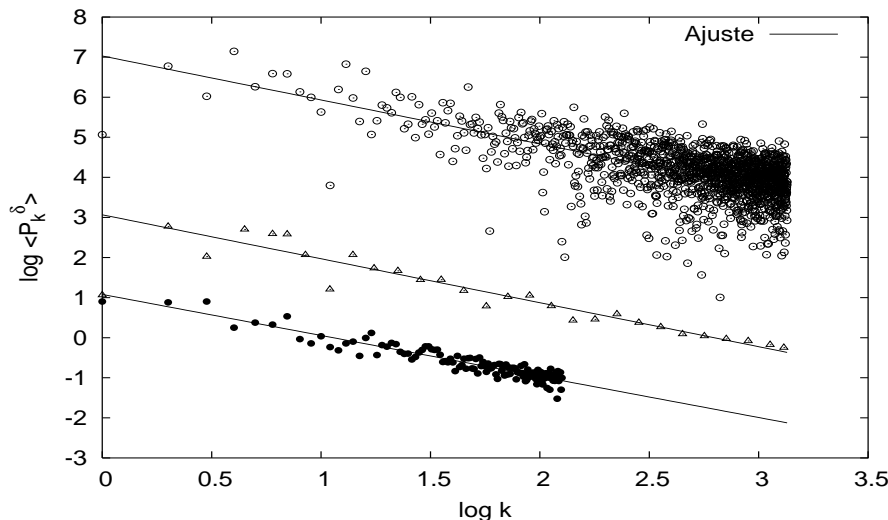


Figura B.1: Espectro de potencias de una realización de una matriz EGOE(2) sin promediar, promediando utilizando ventanas en escala logarítmica y promediando a base de dividir el espectro en 10 secuencias tratadas como independientes.

B.2. El espectro de potencias

Como ya se dijo en la sección 3.3, es muy útil recurrir directamente al espectro de potencias $P(\omega) = |F(\omega)|^2$ (o $P_k = |\hat{x}_k|^2$ en su versión discreta) para caracterizar una serie temporal; la principal ventaja sobre la transformada de Fourier es que el espectro de potencias es una magnitud real. Además, el espectro de potencias puede aplicarse a un proceso estocástico, representado por diversas realizaciones del mismo, sin ambigüedades matemáticas; eso permite, por ejemplo, definir correctamente el espectro de potencias de una colectividad de matrices aleatorias.

Una vez obtenida la transformada de Fourier, el cálculo del espectro de potencias es trivial, ya que lo único que hay que hacer es calcular el módulo al cuadrado de la transformada para cada frecuencia. La única dificultad importante aparece a la hora de buscar una ley de potencias en una realización de un proceso estocástico: la representación en escala doble logarítmica hace que el ruido se amplifique hasta resultar casi imposible determinar con exactitud el valor de la pendiente. Este fenómeno se conoce con el nombre de *musgo español*⁸ [95] y se puede solucionar haciendo algún tipo de promedio; a lo largo de esta tesis doctoral hemos utilizado tres posibilidades:

- Si se dispone de más de una realización del proceso, se puede estudiar el espectro de potencias medio de la colectividad.

⁸Traducción literal del inglés *Spanish moss*.

- Si la serie es lo bastante larga, se puede dividir en varios fragmentos, calcular el espectro de potencias de manera independiente para cada uno de ellos y obtener así una media como la anterior.
- En el caso de que ninguno de los dos procedimientos anteriores resulte satisfactorio, se puede proceder del siguiente modo: una vez escritos los datos en forma logarítmica, se divide el rango de frecuencias $\log k \in [0, \dots, \log(N - 1)]$ en M fragmentos de igual longitud y se presenta solamente un punto representativo por cada fragmento (por ejemplo, su valor medio).

En la figura B.1 se muestra el espectro de potencias de una matriz EGOE (véase capítulo 4). La curva superior (círculos blancos) corresponde al espectro de potencias sin ningún tipo de promediado; se puede apreciar que las fluctuaciones con respecto a la tendencia media (línea recta) son demasiado grandes. La curva central (triángulos blancos) corresponde al tercero de los promedios que se acaban de presentar; la tendencia es la misma que en el caso anterior, pero las fluctuaciones apenas ensucian el resultado. La curva inferior (círculos negros) corresponde al segundo de los métodos de promedio; al igual que en el caso anterior, la tendencia sigue siendo la misma, pero la serie resultante es mucho más corta, lo que dificulta un poco la obtención de conclusiones.

Apéndice C

Proceso de reescalado

Según se vio en el primer capítulo, la densidad de estados de un sistema cuántico se divide en una parte suave $\bar{g}(E)$ y una parte fluctuante $\tilde{g}(E)$. El estudio de las fluctuaciones estadísticas del espectro como traza del caos en mecánica cuántica se basa en que $\tilde{g}(E)$ presenta propiedades universales, que dependen solamente de si el sistema es caótico o integrable. Para abordar dicho estudio es necesario remover la contribución de $\bar{g}(E)$ en el espectro, lo cual se consigue reescalando el espectro globalmente de modo que $\bar{g}(E) = 1$. En este apéndice describimos los aspectos técnicos del proceso de reescalado; nos centramos en cómo proceder cuando no existe una expresión analítica para la parte suave de la densidad de estados.

C.1. Definición del proceso de reescalado

La forma más sencilla y eficaz de remover la contribución de $\bar{g}(E)$ en el espectro es transformando la secuencia de niveles $\{E_i\}$ en una nueva secuencia adimensional $\{\epsilon_i\}$

$$E_i \rightarrow \epsilon_i = \bar{N}(E_i), \quad i = 1, \dots, N, \quad (\text{C.1})$$

donde N es la dimensión del espectro y $\bar{N}(E)$, siguiendo la notación introducida en [38], es

$$\bar{N}(E) = \int_{-\infty}^E dx \bar{g}(x). \quad (\text{C.2})$$

C.2. Cálculo analítico de $\bar{N}(E)$

En algunos sistemas es posible calcular una expresión analítica para la parte suave de la densidad, de forma que la extracción de la parte fluctuante del espectro se realiza de forma sencilla y sin ambigüedades.

- Las colectividades de matrices aleatorias siguen una ley semicircular [37].
- Los billares en dos y tres dimensiones verifican la ley de Weyl, que es una generalización de la ecuación (2.34) [26].
- En los núcleos atómicos, la densidad de estados se describe bastante bien con la fórmula empírica de Bethe [96]. Sin embargo, los cálculos basados en modelo de capas no reproducen bien esta expresión, ya que sólo se consideran en el cálculo un número finito de estados de partícula independiente. En estos casos suelen utilizarse Gaussianas corregidas [97] o expresiones un poco más sofisticadas [98]. No obstante, ninguno de estos procedimientos se libra de ciertos problemas en los bordes, de forma que éstos suelen eliminarse para el proceso de reescalado y el consiguiente estudio estadístico.

En otras ocasiones no es posible realizar el cálculo exacto de forma analítica, pero sí una buena aproximación, de modo que el trabajo se reduce al ajuste de un conjunto pequeño de parámetros libres; los métodos presentados en [97] y [98] son de este tipo.

C.3. Aproximación de $\overline{N}(E)$

En muchas ocasiones los métodos analíticos no permiten obtener una expresión para la densidad de estados, ni siquiera de forma aproximada; cuando esto ocurre, no queda más remedio que calcular $\overline{N}(E)$ directamente a partir del espectro, sin ninguna información adicional. Este problema es en general muy complejo, ya que nunca es posible discernir con toda exactitud qué procede de la parte suave y qué de la parte fluctuante. A lo largo de las últimas décadas se han propuesto muchos métodos diferentes, cuya eficacia depende en la mayoría de las ocasiones del sistema que se esté estudiando; una revisión crítica de algunos de estos métodos puede encontrarse en [40].

Siempre que ha sido necesario, en esta tesis doctoral hemos calculado $\overline{N}(E)$ ajustando el espectro mediante el método de mínimos cuadrados a funciones ortogonales, concretamente a polinomios de Chebyshev. A continuación describimos los detalles del proceso, utilizando como espectro prueba el de una matriz GOE de dimensión $N = 10000$.

Una vez obtenido el espectro del sistema, el proceso de reescalado comienza con el cálculo de $N(E)$, que tiene forma de escalera. En la figura C.1 se representa dicha función para los primeros niveles del espectro prueba; en ella se puede apreciar que la forma global de la escalera es curva y que el tamaño de los escalones disminuye al aumentar la energía; el objetivo del reescalado consiste en eliminar estos dos efectos. A partir de $N(E)$ puede obtenerse una buena aproximación para $\overline{N}(E)$, ajustando

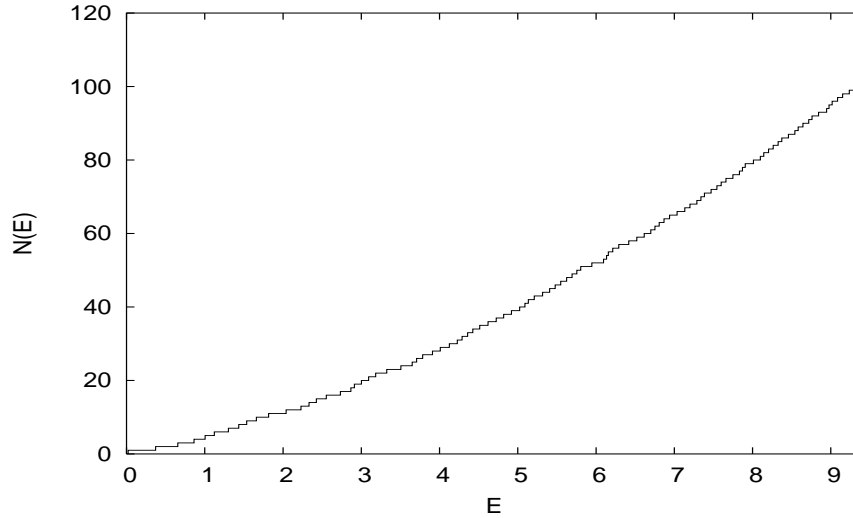


Figura C.1: Función $N(E)$ para los primeros niveles de un espectro GOE de dimensión $N = 10000$.

la primera mediante una función suave, que no tiene en cuenta las irregularidades de los escalones, sino su forma global. La función suave escogida es un desarrollo en polinomios de Chebyshev [61]

$$\frac{1}{2}a_0T_0(\bar{x}) + a_1T_1(\bar{x}) + a_2T_2(\bar{x}) + \dots + a_iT_i(\bar{x}), \quad (\text{C.3})$$

donde $T_j(\bar{x})$ es el polinomio de Chebyshev de primer orden de grado j y \bar{x} es la energía E normalizada a un rango $(-1, 1)$ según

$$\bar{x} = \frac{2E - E_{max} - E_{min}}{E_{max} - E_{min}}. \quad (\text{C.4})$$

En la figura C.2 se presenta la función $N(\epsilon)$ para el espectro reescalado; en ella se ve que ahora su forma global es rectilínea y que el tamaño de los escalones no varía con la energía.

El principal problema a la hora de realizar el ajuste es la selección del orden i del polinomio de Chebyshev: un orden demasiado pequeño no permite ajustar la forma global con suficiente exactitud, mientras que un orden demasiado grande produce efectos espurios, al considerar como parte suave las fluctuaciones de periodo más grande. Un primer requisito del proceso de reescalado consiste en que el espaciamiento medio cumpla $\langle s \rangle \approx 1$, de modo que pueden descartarse aquellos ajustes que den lugar a un $\langle s \rangle$ alejado de la unidad. En la tabla C.1 se adjuntan los valores de $\langle s \rangle$ resultantes del reescalado con polinomios de Chebyshev de diferente orden i ; en ella se ve que el resultado empieza a ser bueno a partir $i = 5$ y que en general mejora al aumentar el orden.

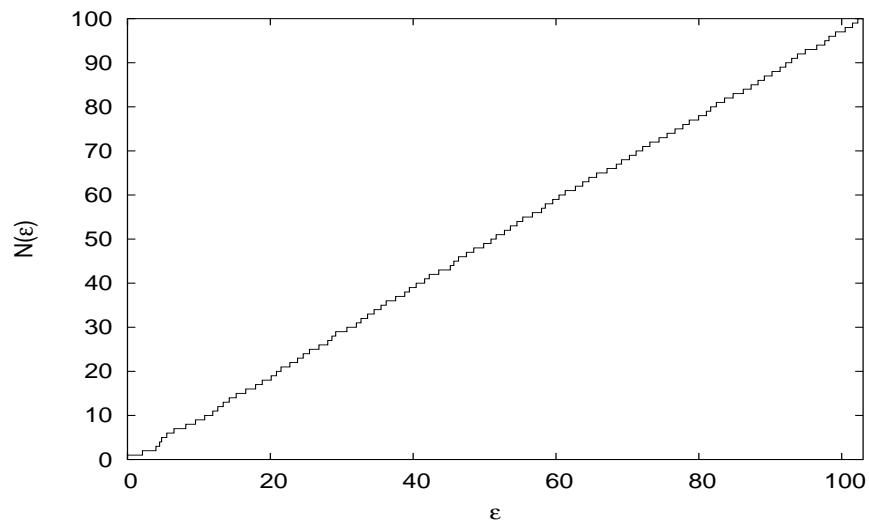


Figura C.2: Función $N(\epsilon)$ para los primeros niveles reescalados de un espectro GOE de dimensión $N = 10000$.

Orden	$\langle s \rangle$
3	0.93425
5	0.99358
10	1.00280
20	1.00013
40	1.00014
80	0.99999

Tabla C.1: Valor del espaciamento medio $\langle s \rangle$ para un espectro GOE reescalado con polinomios de Chebyshev de diferente orden.

El criterio $\langle s \rangle \approx 1$ marca una cota inferior para el orden del polinomio, pero no aporta ninguna información sobre los efectos espurios que se producen con órdenes demasiado elevados; en todo caso induce a seleccionar un orden *razonable*, por ejemplo el menor que satisfaga una cierta precisión.

Para encontrar un criterio más cuantitativo es mejor acudir a las correlaciones de largo alcance, ya que éstas son mucho más sensibles al proceso de reescalado que el valor medio o la distribución de espaciamientos [40]. En la figura C.3 se muestra la función δ_n para el espectro prueba reescalado con los mismos polinomios que en el cálculo anterior. Una simple inspección visual es suficiente para descartar los órdenes 3 y 5: en estos casos, la función δ_n muestra desviaciones suaves con respecto a su valor medio, que proceden, sin duda, de la parte suave de la densidad de estados. Todos los órdenes superiores, sin embargo, son bastante parecidos: apenas se nota una disminución en la amplitud de las fluctuaciones, así como una mayor concentración en torno al valor medio; en principio no hay nada que incite a escoger uno de ellos.

La figura C.4 muestra el espectro de potencias de la función δ_n correspondiente a los casos anteriores; en cada gráfica se adjunta la recta correspondiente al ajuste por mínimos cuadrados del espectro reescalado con un polinomio de orden 10. El resultado para los dos primeros casos confirma la conclusión obtenida con la simple inspección visual de la función δ_n : la presencia de términos procedentes de la parte suave de la densidad produce un resultado espurio en el espectro de potencias. La aportación fundamental del estudio de las correlaciones de largo alcance se observa en órdenes superiores. Los resultados obtenidos ponen claramente de manifiesto que un orden demasiado elevado también produce efectos espurios en la estructura de correlación; en particular, las fluctuaciones de baja frecuencia (o alto periodo) tienden a desaparecer al aumentar el orden. La explicación de este fenómeno es sencilla: si el orden del polinomio es demasiado grande, éste no sólo ajusta la forma global de la densidad de estados, sino también las fluctuaciones de periodo más grande, que son las más suaves; según se va aumentando el orden, el periodo máximo ajustado con el polinomio es cada vez más pequeño.

A la vista de todo lo anterior, el criterio para seleccionar el orden del polinomio de reescalado es bastante sencillo: éste ha de dar lugar a un valor medio del espaciamiento $\langle s \rangle \approx 1$ y no ha de alterar la estructura de correlaciones. Este criterio, sin embargo, no es siempre fácil de aplicar. En el caso del espectro prueba que hemos utilizado a lo largo de todo el apéndice, parece evidente que el orden 10 es el más apropiado: el espectro de potencias es de la forma $S(k) \propto k^{-\alpha}$ con $\alpha \approx 1$ y no se producen grandes anomalías a baja frecuencia. En otros casos, en cambio, puede ocurrir que no haya fluctuaciones de baja frecuencia¹, o que el espectro de potencias presente desviaciones físicas con respecto a $S(k) \propto k^{-\alpha}$. Una posible solución puede

¹Como se vio en los capítulos 1 y 3, la fluctuación de más baja frecuencia está asociada a la órbita periódica de periodo más corto.

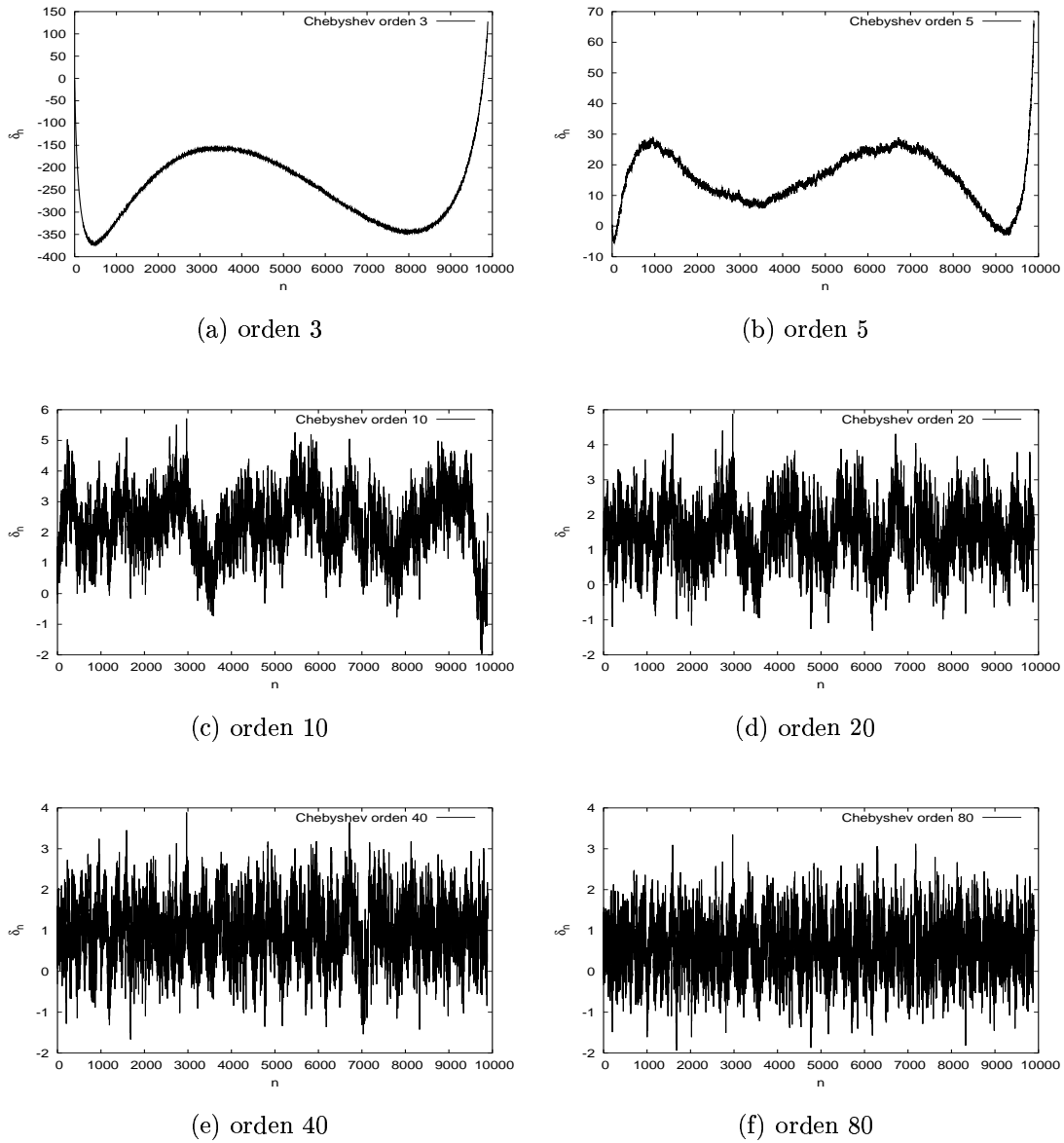
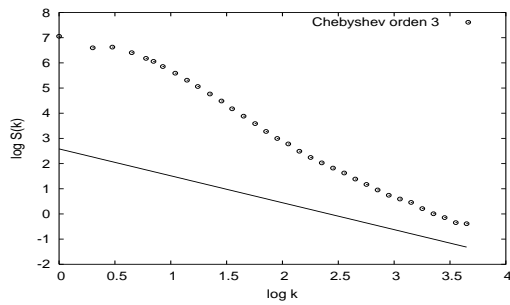
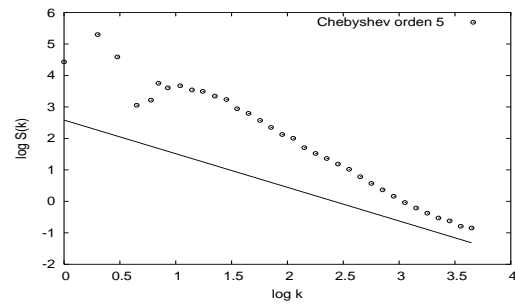


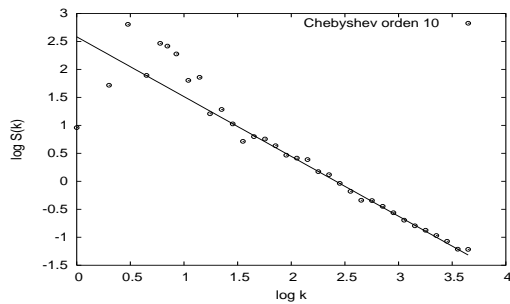
Figura C.3: Función δ_n para una matriz GOE reescalada utilizando polinomios de Chebyshev a los órdenes que se indican.



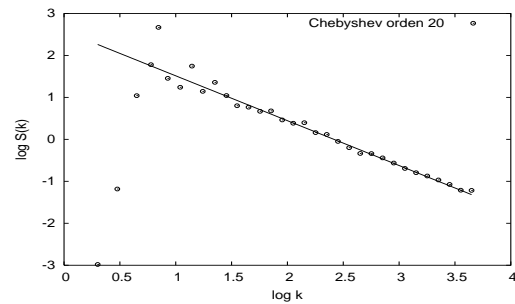
(a) orden 3



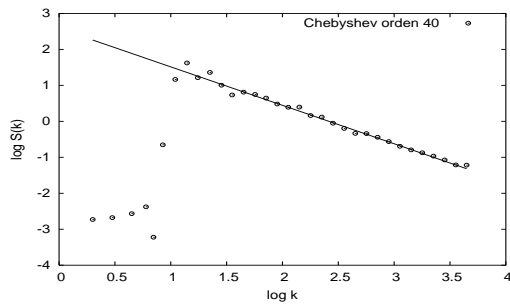
(b) orden 5



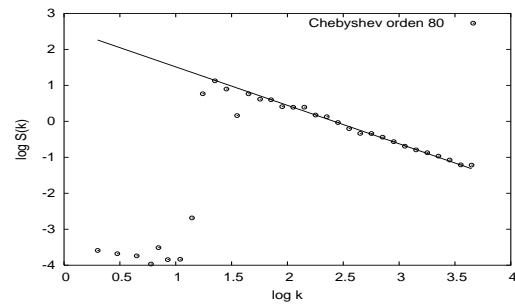
(c) orden 10



(d) orden 20



(e) orden 40



(f) orden 80

Figura C.4: Espectro de potencias de la función δ_n para una matriz GOE reescalada utilizando polinomios de Chebyshev a distintos órdenes. La línea continua representa el ajuste por mínimos cuadrados a una ley $P(k) \propto k^{-\alpha}$ del espectro reescalado con un polinomio de orden 10.

consistir en seleccionar un orden a partir este tipo de análisis y repetir el cálculo a continuación en un entorno pequeño de dicho orden: si las anomalías globales o de baja frecuencia se deben a efectos físicos deben permanecer invariables al cambiar el orden del polinomio de reescalado; en caso contrario, los efectos espurios han de estar relacionados directamente con este proceso.

Bibliografía

- [1] A. F. Rañada, *Dinámica Clásica*, Ed. Alianza, 1990. A. F. Rañada, *Comportamiento Caótico en Mecánica No Lineal*, Anales de Física, **79A**, 67 (1983).
- [2] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer New York, 1978.
- [3] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer New York 1990.
- [4] A. F. Rañada (selección), *Orden y Caos*, Libros de Investigación y Ciencia, 1990.
- [5] P. Cvitanovich, *Universality in Chaos*, Adam Springer Bristol 1984.
- [6] R. M. May, *Simple mathematical models with very complicated dynamics*, Nature, **261**, 459 (1976).
- [7] Ricard V. Solé, Susanna C. Manrubia, *Orden y caos en sistemas complejos. Fundamentos*, Ediciones UPC, 2001.
- [8] S. Weigert, *The problem of quantum integrability*, Physica A, **D56**, 107 (1992).
- [9] J. von Neumann, *Über Funktionen Von Funktionaloperatoren*, Ann. Math., **32**, 191 (1931).
- [10] R. Cirelli, L. Pizzocchero, *On the integrability of quantum mechanics as an infinite dimensional Hamiltonian system*, Nonlinearity, **3**, 1057 (1990). B. A. Kupershmidt, *Quantum mechanics as an integrable system*, Phys. Lett. A, **109** 136 (1985). A. Enciso, D. Peralta-Salas, *Integrability of Hamiltonians with pure point spectrum and Berry's conjecture*, a publicar.
- [11] W-M. Zhang, D. H. Feng, J-M. Yuan, S-J. Wang, *Integrability and nonintegrability of quantum systems: Quantum integrability and dynamical symmetry*, Phys. Rev. A, **40** 438 (1989). W-M. Zhang, D. H. Zeng, J-M. Yuan, *Integrability and nonintegrability of quantum systems. II. Dynamics in quantum phase space*, Phys. Rev. A, **42**, 7125 (1990).

- [12] J-M. Lévy-Leblond, *Who is Afraid of Nonhermitian Operators? A Quantum Description of Angle and Phase*, Ann. Phys. **101**, 319 (1976). M. Mishinsky, T. H. Seligman, *Canonical Transformations to Action and Angle Variables and Their Representation in Quantum Mechanics*, Ann. Phys, **114**, 243 (1978). A. Luis, L. L. Sánchez-Soto, *Canonical transformations to action and phase-angle variables and phase operators*, Phys. Rev. A **48**, 752 (1993).
- [13] S. Weigert, G. Müller, *Quantum integrability and Action Operators in Spin Dynamics*, Chaos, Solitons & Fractals, **5**, 1419 (1995).
- [14] A. Relaño, J. M. G. Gómez, J. Retamosa, J. Dukelsky, *Stringent Numerical Test of the Poisson Distribution for Finite Quantum Integrable Hamiltonians*, Phys. Rev. E **70**, 026208 (2004).
- [15] G. Casati, B. V. Chirikov, I. Guarneri, D. L. Shepelyansky, *Dynamical Stability of Quantum "Chaotic" Motion un Hydrogen Atom*, Phys. Rev. Lett., **56**, 2437 (1986).
- [16] A. Peres, *Quantum Theory: Concepts and Methods*, Kluwer, Dordechdt, 1995.
- [17] T. Prozen, *General relation between quantum ergodicity and fidelity of quantum dynamics*, Phys. Rev. E, **65**, 036208 (2002).
- [18] R. A. Jalabert, H. M. Pastawski, *Environment-Independent Decoherence Rate in Classically Chaotic Systems*, Phys. Rev. Lett., **86** 2490 (2001). J. Emerson, Y. S. Weinstein, S. Lloyd, D. G. Cory, *Fidelity Decay as an Eddicent Indicator of Quantum Chaos*, Phys. Rev. Lett., **89** 284102 (2002). M. Hiller, T. Kottos, D. Cohen, T. Geisel, *Quantum Reversibility: Is there an Echo?*, Phys. Rev. Lett., **92**, 010402 (2004).
- [19] E. J. Heller, *Bound-State Eigenfunctions of Classically Chaotic Hamiltonian Systems: Scars of Periodic Orbits*, Phys. Rev. Lett., **53**, 1515 (1984).
- [20] M. J. Giannoni, A. Voros, J. Zinn-Justin, editors, *Chaos and Quantum Physics*, Les Houches Session LII North-Holland 1989.
- [21] M. V. Berry, *The Bakerian lecture, 1987: Quantum Chaology*, Proc. R. Soc. Lond. A, **413**, 183 (1987). M. V. Berry, *Some quantum-to-classical asymptotics*. Incluido en [20], pag. 251.
- [22] M. V. Berry, M. Tabor, *Level clustering in the regular spectrum*, Proc. R. Soc. Lond. A, **356**, 375 (1977).

- [23] O. Bohigas, M. J. Gianonni, C. Schmit, *Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws*, Phys. Rev. Lett., **52**, 1 (1984).
- [24] J. Ishiwara, Tokyo Sugaku Buturigakkawi Kizi, **8**, 106 (1915). A. Sommerfeld, Ann. Phys. (Leipzig), **51**, 125 (1916). W. Wilson, Phil. Mag., **29**, 795 (1915).
- [25] C. M. Bender, K. Olaussen, P. S. Wang, *Numerological analysis of the WKB approximation in large order*, Phys. Rev. D, **16**, 16 (1977).
- [26] R. Balian, C. Bloch, *Distribution of Eigenfrequencies for the Wave Equation in a Finite Domain I. Three-Dimensional Problem with Smooth Boundary Surface*, Ann. Phys. **60**, 401 (1970).
- [27] M. Brack, R. K. Bhanduri, *Semiclassical Physics*, Westview press, 2003.
- [28] A. Einstein, *Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein*, Verh. Dtsch. Phys. Ges., 19 (1917).
- [29] M. C. Gutzwiller, *Phase-integral approximation in momentum space and the bound states of an atom*, J. Math. Phys., **8**, 1979 (1967). M. C. Gutzwiller, *Phase-integrale approximation in momentum space and the bound states of an atom. II*, J. Math. Phys., **10**, 1004 (1969). M. C. Gutzwiller, *Energy spectrum according to classical mechanics*, J. Math. Phys., **11**, 1791 (1970). M. C. Gutzwiller, *Periodic orbits and classical quantization conditions*, J. Math. Phys., **12**, 343 (1971).
- [30] R. P. Feynmann, A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [31] M. V. Berry, M. Tabor, *Calculating the bound spectrum by path summation in action-angle variables*, J. Phys. A, **10**, 371 (1977).
- [32] H-J. Stöckmann, *Quantum Chaos – an introduction*, Cambridge University Press, 1999.
- [33] T. Prosen, M. Robnik, *Failure of semiclassical methods to predict individual energy levels*, J. Phys. A, **26**, L37 (1993).
- [34] J. H. Hannay, A. M. Ozorio De Almeida, *Periodic orbits and a correlation function for the semiclassical density of states*, J. Phys. A, **17**, 3429 (1984).
- [35] F. J. Dyson, *Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. I*, J. Math. Phys. **3**, 140 (1963). F. J. Dyson, *Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. II*, J. Math. Phys. **3**, 157 (1963). F. J. Dyson. *Statistical*

- Theory of the Energy Levels of Complex Systems. III*, J. Math. Phys. **3**, 166 (1963). F. J. Dyson, M. L. Mehta. *Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems IV*, J. Math. Phys. **4**, 701 (1963). M. L. Mehta, F. J. Dyson, *Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. V*, J. Math. Phys. **4**, 713 (1963).
- [36] T. Guhr, A. Müller-Groeling, H. A. Weidenmüller, *Random-Matrix Theories in quantum physics: common concepts*, Phys. Rep., **299**, 189 (1998).
- [37] M. L. Mehta, *Random Matrices*, Academic Press, London (1991).
- [38] A. Relaño, J. M. G. Gómez, R. A. Molina, J. Retamosa, E. Faleiro, *Quantum Chaos and 1/f noise*, Phys. Rev. Lett. **89** 244102 (2002).
- [39] R. A. Molina, *Caos cuántico en sistemas hamiltonianos de muchos cuerpos*. Tesis Doctoral. Universidad Complutense de Madrid.
- [40] J. M. G. Gómez, R. A. Molina, A. Relaño, J. Retamosa, *Misleading signatures of quantum chaos*. Phys. Rev. E **66** 036209 (2002).
- [41] M. V. Berry, *Semiclassical theory of spectral rigidity*, Proc. R. Soc. Lond. A **400**, 229 (1985).
- [42] M. V. Berry, *Chaotic Behaviour of Deterministic Systems*, ed. G. Iooss et al, Amsterdam: North-Holland, 171 (1983). M. V. Berry, M. Robnik, *Semiclassical level spacings when regular and chaotic orbits coexist*, J. Phys. A **17**, 2413 (1984). T. H. Seligman, J. J. M. Verbaarschot, *Fluctuations of quantum spectra and their semiclassical limit in the transition between order and chaos*, J. Phys. A **18** 2227 (1985).
- [43] S. Tomsovic, D. Ullmo, *Chaos-assisted tunneling*, Phys. Rev. E **50**, 145 (1994).
- [44] V. A. Podolsky, E. E. Narimanov, *Semiclassical Description of Chaos-Assisted Tunneling*, Phys. Rev. Lett., **91** 263601 (2003). V. A. Podolski, E. E. Narimanov, *Universal level-spacings distribution in quantum systems*, arXiv:nlin.CD/0310034 (2003).
- [45] M. Siebert, *Uniform approximation for bifurcations of periodic orbits with high repetition numbers*, J. Phys. A **29**, 4715 (1996). H. Schomerus, M. Siebert, *Bifurcations of periodic orbits and uniform approximations*, J. Phys. A **30**, 4537 (1997).
- [46] T. A. Brody, Lett. Nuovo Cimento **7**, 482 (1973). T. A. Brody, J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey, S. S. M. Wong *Random-matrix physics: spectrum and strength fluctuations*, Rev. Mod. Phys. **53** 385 (1981).

- [47] F. M. Izrailev, *Phys. Lett. A* **134**, 13 (1988).
- [48] C.-K. Peng, J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Halvin, H. E. Stanley, A. L. Goldberger, *Long-Range Anticorrelations and Non-Gaussian Behaviour of the Heart-beat*, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1343 (1993).
- [49] D. L. Gilden, T. Thornton, M. W. Mallon, *1/f Noise in Human Cognition*, *Science* **267**, 1837 (1995).
- [50] N. P. Greis, H. S. Greenside, *Implication of a power-law power-spectrum for self-affinity*, *Phys. Rev. A* **44**, 2324 (1991).
- [51] J. Feder, *Fractals*, Plenum Press 1988.
- [52] M. B. Priestley, *Spectral analysis and time series*, Academic 1981.
- [53] B. B. Mandelbrot, J. W. Van Ness, *Fractional Brownian motion, fractional noises and applications*. *SIAM Rev.* **10** 422 (1968).
- [54] T. Higuchi, *Relationship between the fractal dimension and the power law index for a time series: numerical investigation*. *Physica D*, **46** 254 (1990).
- [55] K. Falconer, *Fractal Geometry. Mathematical Foundations and Applications*. John Wiley & Sons, 1990.
- [56] M. Schroeder, *Fractal Chaos and Power Laws*. Freeman, 1991.
- [57] W. Li, *A Bibliography on 1/f Noise* <http://www.nslj-genetics.org/wli/1fnoise/>.
- [58] M. J. Cannon et al, *Physica A* **241**, 606 (1997).
- [59] T. G. M. Kleinpenning, A. H. Kuijper, *Relation between variance and sample duration of 1/f noise signals*. **63** 43 (1987).
- [60] A. Bäcker, *Numerical aspects of eigenvalue and eigenfunction computations for chaotic quantum systems*, en *The Mathematical Aspects of Quantum Maps*, M. Degli Esposti and S. Graffi (Eds.) Springer Lecture Notes in Physics **618**, 91-144 (2003).
- [61] Librería computacional NAG, <http://www.nag.co.uk>.
- [62] V. K. B. Kota, *Embedded random matrix ensembles for complexity and chaos in finite interacting particle systems*, *Phys. Rep.* **347**, 223 (2001).

- [63] J. B. French, S. S. M. Wong, Phys. Lett. B **33**, 449 (1970). O. Bohigas, J. Flores, Phys. Lett. B **34**, 261 (1971).
- [64] O. Bohigas, J. Flores, Phys. Lett. B **34**, 383 (1971).
- [65] L. Benet, T. Rupp, H. A. Weindenmüller, *Spectral Properties of the k -Body Embedded Gaussian Ensembles of Random Matrices*, Ann. Phys. **292**, 67 (2001).
- [66] J. Flores, M. Horoi, M. Müller, T. H. Seligman, *Spectral statistics of the two-body random ensemble revisited*, Phys. Rev. E **63**, 026204 (2000). A. D. Jackson, C. Mejía-Monasterio, T. Rupp, M. Saltzer, T. Wilke, Nucl. Phys. A **687**, 405 (2001).
- [67] A. Relaño, R. A. Molina, J. Retamosa, *1/f noise in the Two-Body Random Ensemble*, Phys. Rev. E **70**, 017201 (2004).
- [68] R. U. Haq, A. Pandey, O. Bohigas, *Fluctuation Properties of Nuclear Energy Levels: Do Theory and Experiment Agree?*, Phys. Rev. Lett. **48**, 1086 (1982).
- [69] B. H. Wildenthal, M. S. Curtin, B. A. Brown, *Predicted features of the beta decay of neutron-rich sd -shell nuclei*, Phys. Rev. C **28**, 1343 (1983).
- [70] E. Caurier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, J. Retamosa, A. P. Zucker, *Full $0\hbar\omega$ shell model calculation of the binding energies of the $1f_{7/2}$ nuclei*, Phys. Rev. C **59**, 2033 (1999).
- [71] A. G. Monastra, *Fluctuations quantiques dans les systèmes fermioniques de taille finie*, Tesis Doctoral, Universidad País XI, 2002.
- [72] M. Barth, U. Kuhl, H.-J. Stöckmann, *Global and local level dynamics in chaotic microwave billiards*, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, 733 (1999). M. Barth, U. Kuhl, H.-J. Stöckmann, *Global versus Local Billiard Level Dynamics: The Limits of Universality*, Phys. Rev. Lett. **82**, 2026 (1999).
- [73] H.-J. Stöckmann, J. Stein, *“Quantum” Chaos in Billiards Studied by Microwave Absorption*, Phys. Rev. Lett. **64**, 2215 (1990).
- [74] J. Stein, H.-J. Stöckmann, U. Stoffregen, *Microwave Studies of Billiard Green Functions and Propagators*.
- [75] H. Alt, H.-D. Gräf, R. Hofferbert, C. Rangacharyulu, H. Rehfeld, A. Richter, P. Schardt, A. Wirzba, *Chaotic dynamics in a three-dimensional superconducting microwave billiard*, Phys. Rev. E **54**, 2303 (1996).

- [76] E. Faleiro, J. M. G. Gómez, R. A. Molina, L. Muñoz, A. Relaño and J. Retamosa, *Theoretical derivation of $1/f$ noise in quantum chaos*, enviado a Phys. Rev. Lett.
- [77] *Handbook of Mathematical Functions*, eds. M. Abramowitz and I. Stegun, (Dover Publications, INC., New York, 1972).
- [78] J. B. French, V. K. B. Kota, A. Pandey, S. Tomosovic, *Statistical Properties of Many-Particle Spectra V. Fluctuations and Symmetries*, Ann. Phys. **181**, 198 (1988).
- [79] M. Robnik, *Classical dynamics of a family of billiards with analytic boundaries*, J. Phys. A **16**, 3971 (1983).
- [80] A. Hönl, D. Wintgen, *Spectral properties of strongly perturbed Coulomb systems: Fluctuation properties*, Phys. Rev. A **39**, 5642 (1989).
- [81] H. R. Dullin, A. Bäcker, *About ergodicity in the family of limaçon billiards*, Nonlinearity **14**, 1673 (2001).
- [82] A. Hayli, T. Dumont, J. Moulin-Ollagnier, J.- M. Strelcyn, *Some new results on Robnik billiards*, J. Phys. A **20**, 3237 (1987).
- [83] R. Markarian, *New ergodic billiards: exact results*, Nonlinearity **6**, 819 (1993).
- [84] M. Robnik, *Quantising a generic family of billiards with analytic boundaries*, J. Phys. A **17**, 1049 (1984). B. Li, M. Robnik, *Statistical properties of high-lying chaotic eigenstates*, J. Phys. A **27**, 5509 (1994).
- [85] M. Robnik, preprint CAMTP/December 2003, a publicar.
- [86] M. P. Pato, C. A. Nunes, C. L. Lima, M. S. Hussein, Y. Alhassid, *Deformed Gaussian orthogonal ensemble analysis of the interacting boson model* Phys. Rev. C **49**, 2919 (1994).
- [87] Y. Alhassid, R. D. Levine, *Nearest-neighbor level spacing distributions: On the transition from regular to the chaotic regimes*, Phys. Rev. A **40**, 5277 (1989).
- [88] G. Lenz, F. Haake, *Transitions between Universality Classes of Random Matrices*, Phys. Rev. Lett. **65**, 2325 (1990).
- [89] D. Weinmann, P. Schmitteckert, R. A. Jalabert, J-L. Pichard, *Deslocalization effects and charge reorganizations induced by repulsive interactions in strongly disordered systems* Eur. Phys. J. B **19**, 139 (2001).

- [90] A. P. Zuker, L. W. Ndeuna, F. Nowacki, E. Caurier, *Canonical form of Hamiltonian matrices*, Phys. Rev. C **64**, R021304 (2001). A. P. Zuker, *Binomial Level Densities*, Phys. Rev. C **64**, R021303 (2001). L. Waha Ndeuna, *Propriétés des matrices hamiltoniennes das la base tridiagonale*, thèse de doctorat, IReS, Strasbourg (1999).
- [91] R. A. Molina, A. P. Zuker, A. Relaño, J. Retamosa, *Spectral statistics of Hamiltonian matrices in tridiagonal form*, a publicar.
- [92] J. H. Wilkinson, *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Oxford University Press, Oxford (1965).
- [93] J. O. Smimth, *Mathematics of the Discrete Fourier Transform (DFT)* <http://ccrma-www.stanford.edu/jos/mdft/>, 2003, ISBN 0-9745607-0-7.
- [94] W. H. Press, G. B. Rybicki, *Fast Algorithm for spectral analysis of unevenly sampled data*, Ap. J. **338** 277 (1989).
- [95] B. B. Mandelbrot, *Multifractals and 1/f noise*, Springer-Verlag New York, 1999.
- [96] H. A. Bethe, *An Attempt to Calculate the Number of Energy Levels of a Heavy Nucleus*, Phys. Rev. **50**, 332 (1936).
- [97] S. S. M. Wong, *Nuclear Statistical Spectroscopy*, Oxford University Press, New York (1986).
- [98] A. P. Zucker, *Binomial level densities*, Phys. Rev. C **64**, 021303 (2001).