

Teoría de Matrices Aleatorias, Polinomios Ortogonales y Variables de Grassmann

Andrés Granados del Águila

ALumno de 5º curso de la Licenciatura en Física de la UCM

Director: Joaquín Retamosa Granado
Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear
Universidad Complutense de Madrid

23 de septiembre de 2008

Resumen

Este trabajo desarrolla un método general, compacto y elegante, basado en la teoría de polinomios ortogonales y en la utilización de variables de Grassmann, para obtener las diferentes propiedades de colectividades de matrices aleatorias complejas.

Índice

I INTRODUCCIÓN AL CAOS	5
1. Introducción Histórica	5
2. Una Breve Idea sobre el Caos Clásico	5
3. Caos Cuántico	6
3.1. Breve reseña histórica	6
3.2. Definición de Caos Cuántico	6
3.3. Matrices Aleatorias	9
3.4. Conjetura BGS	10
3.5. Importancia de las simetrías	10
3.6. Análisis estadístico de los niveles	10
3.7. Distribución de Poisson	11
3.8. Representación de los hamiltonianos	11
3.9. Distribución de Wigner	12
3.10. Definición del conjunto gaussiano de matrices	12
3.11. Función de correlación de autoenergías	13
3.12. Correlación espectral	13
3.13. Ley del semicírculo de Wigner	13
3.14. Caos Cuántico en sistemas de muchos cuerpos	13
II POLINOMIOS ORTOGONALES EN LA TEORÍA DE MATRICES ALEATORIAS	15
4. INTRODUCCIÓN	15
4.1. La Distribución de Probabilidad como función de Polinomios Ortogonales	15
4.2. Introducción de las Variables de Grassmann	17
4.3. Determinación de la constante de normalización \mathcal{N}	17
4.4. Densidad de autovalores	19
4.4.1. Aplicación a Diferentes colectividades	21
4.5. Funciones de Correlación	23
4.6. Funciones de Correlación reescaldas	25
4.6.1. Unfolding o reescalado del espectro	25
4.6.2. El unfolding en la Teoría de Matrices Aleatorias (TMA)	26
5. CONCLUSIONES	29

Parte I

INTRODUCCIÓN AL CAOS

1. Introducción Histórica

Para conmemorar la celebración del sexagésimo cumpleaños del rey Oscar II de Suecia y Noruega en 1889, se planteó la siguiente pregunta:

Sea un sistema de masas puntuales arbitrario, de forma que siguen las leyes de la Gravitación universal newtoniana. Asumiendo que las masas no colisionan, hallense las coordenadas de los puntos individuales para todo tiempo, en función de series convergentes de funciones conocidas

Posteriormente, esta pregunta se conocerá como el problema de la estabilidad del Sistema Solar. El científico que halló la respuesta fue Henri Poincaré, quien, en una primera versión del trabajo, creyó haber probado que el sistema era completamente estable y predecible para todo tiempo. Pero, tras hallarse un error en su demostración, y concedérsele un plazo para corregirlo, concluyó de forma totalmente opuesta. Si bien es posible conocer las trayectorias para tiempos finitos, es imposible para infinitos:

...puede ocurrir que pequeñas diferencias en las condiciones iniciales produzcan grandes diferencias en el resultado final. Un pequeño error en el primero conduciría a un gran error en el segundo. La predicción se convierte en algo imposible, y aparecen los fenómenos fortuitos

A pesar de las conclusiones de Poincaré, no fue hasta 1962, cuando Edward Lorenz realizó una simulación numérica del sistema de ecuaciones diferenciales que rige la convección en un fluido, y apreció un comportamiento complejo muy dependiente de las condiciones iniciales. Fue a partir de este estudio cuando cobró más importancia el análisis de las condiciones iniciales y su posterior influencia en el comportamiento dinámico de los sistemas. A mediados de la década de 1960, a través del trabajo de Steve Smale, se probó que podrían existir ecuaciones diferenciales en las que la sensibilidad a las condiciones iniciales fuese algo genérico. Y a finales de la misma década, las simulaciones con ordenador comenzaron a ser algo común para estudiar estas ecuaciones. Durante los 70, aunque el término "caos" se había asociado siempre a distintas formas de aleatoriedad, este empezó a identificarse con la sensibilidad a las condiciones iniciales. Ya a principios de los 80, se habían hallado indicios de comportamiento caótico en distintos tipos de sistemas como mecánicos, eléctricos y fluidos. Lo que sugería que el caos era la fuente de muchos e importantes fenómenos.

2. Una Breve Idea sobre el Caos Clásico

Consideremos un sistema de N partículas con cierta interacción entre ellas. La evolución del sistema viene dada por un conjunto de ecuaciones diferenciales. Si el sistema es resoluble, diremos que es integrable. El ejemplo más sencillo de estos sistemas son los lineales y los conservativos. Existen sin embargo, sistemas en los cuales no es posible reducir todas las interacciones particulares a un comportamiento global. En estos casos, se trata de un sistema no integrable y daría

lugar a efectos caóticos. La integrabilidad o no de un sistema no depende del número de partículas que intervienen, si no de la naturaleza de la interacción. Por tanto, según sea la forma del hamiltoniano se podrá hallar o no, la solución del sistema de ecuaciones y saber si se comportan de forma caótica. Estos detalles están más relacionados con la estructura de las ecuaciones diferenciales que con el sistema en sí, por lo que se puede decir que es más un problema matemático que físico.

A pesar de que no existe una definición concreta y universalmente aceptada de caos, Steven. H. Strogatz lo define de la siguiente manera:

El caos es un comportamiento aperiódico a largo plazo en un sistema determinista que exhibe una sensibilidad muy fuerte a las condiciones iniciales

Es decir, pasado un tiempo, el sistema deja de seguir alguna periodicidad y las ecuaciones diferenciales manifiestan su inestabilidad.

Un ejemplo visual: sea una cierta partícula con una trayectoria dada por la ecuación de evolución $r=r(t)$ y con condiciones iniciales $r(0) = r_o; v(0) = v_o$, donde podremos determinar su posición y velocidad para todo t . Si a las condiciones iniciales les añadimos un infinitésimo ϵ , en principio la trayectoria será la misma que con las anteriores condiciones iniciales. Pero si al cabo de un cierto t lo suficientemente grande ya no podemos predecir la posición de la partícula con la ecuación de evolución $r=r(t)$, se ha producido el caos en el sistema.

A pesar de la definición anterior, puede llegar a ser complicado distinguir un sistema periódico con ruido de uno caótico, simplemente atendiendo al espectro del sistema. Para reconocerlo, se disponen de distintas herramientas y criterios como son: exponente de Lyapunov, funciones de correlación, ergodicidad,...

3. Caos Cuántico

3.1. Breve reseña histórica

Aunque el siglo XX se inició con grandes avances, quedaron pendientes algunas preguntas fundamentales. Entre ellas, la famosa polémica entre Boltzmann y Loschmidt:

”Por qué, siendo las leyes de la mecánica reversibles, observamos una flecha del tiempo?”

Boltzmann intuía que la respuesta estaba en el caos o no-integrabilidad (en el sentido de Poincaré) de la mayoría de los sistemas dinámicos. Sin embargo, el advenimiento de la mecánica cuántica como ley más fundamental complicó adicionalmente el panorama. En particular, Einstein señaló la imposibilidad de que los sistemas caóticos cumplieran con las reglas de cuantificación de Bohr-Sommerfeld. Así nació la disciplina denominada Caos Cuántico. Esta no dejaba de ser un contrasentido, ya que los sistemas cuánticos no parecían presentar las inestabilidades de Lyapunov características de los sistemas caóticos.

3.2. Definición de Caos Cuántico

El Caos Cuántico sigue hoy en día sin tener una definición clara, al contrario que el caos clásico o determinista que si está bien definido. Podemos dividir el

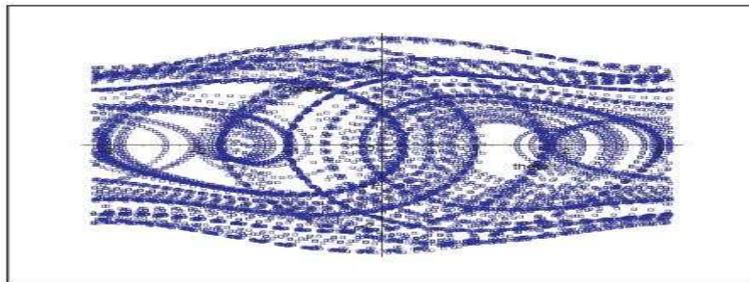


Figura 1: Ergodicidad. El sistema no muestra preferencia por permanecer en ninguna región del mapa de fases

estudio de caos cuántico en:

- Hamiltoniano a un cuerpo, que se correspondería con la aproximación semiclásica. Este caso es más sencillo de estudiar ya que podemos hacer una comparación del sistema cuántico con su análogo clásico.
- Hamiltoniano a un sistema de muchos cuerpos, en el cual no tenemos ya la posibilidad de comparación con su análogo clásico debido al carácter fermiónico o bosónico de las partículas involucradas en el sistema.

Gran parte del estudio del caos cuántico se ha hecho en el límite semiclásico, es por ello que la definición más comúnmente aceptada entre la comunidad científica es la dada por Berry para el primer tipo de sistemas que dice así:

La caología cuántica es el estudio del comportamiento semiclásico, pero no clásico, característico de los sistemas cuyo movimiento clásico exhibe caos.

Para sistemas sin análogo clásico no existe una definición universalmente aceptada, ya que las estadísticas cuánticas juegan un papel fundamental. Existen dos tipos de movimiento radicalmente distintos en la mecánica clásica: el movimiento regular de los sistemas integrables y el movimiento caótico de los sistemas no integrables. Para distinguir el tipo de dinámica que corresponde a

un sistema dado podemos observar un grupo de trayectorias que comiencen en puntos cercanos del espacio de fases. En el caso caótico la distancia entre dos de esas trayectorias cualesquiera crece exponencialmente con el tiempo. El ritmo de crecimiento de esa distancia es lo que se denomina exponente de Lyapunov. Para el movimiento regular el ritmo de crecimiento puede crecer como una potencia, pero nunca de forma exponencial. En este caso decimos que el exponente de Lyapunov es idénticamente cero. En mecánica cuántica la noción de trayectoria en el espacio de fases pierde su sentido y, por tanto, también lo pierde la noción de exponente de Lyapunov. Cuando tenemos un espectro discreto de energías, como en los sistemas cuánticos ligados, la dinámica se caracteriza por ser cuasiperiódica y no puede existir esa sensibilidad a las condiciones iniciales. Como al pasar a la mecánica cuántica se pierde la distinción clásica entre el movimiento regular y el caótico, nos podríamos preguntar si existen otros criterios completamente mecano-cuánticos que nos permitan distinguir dos tipos de dinámica cuántica de forma paralela al caso clásico. Cuando $\hbar \rightarrow 0$ un grupo debe convertirse en regular y el otro en caótico. El nuevo campo del caos cuántico ha demostrado durante estas dos últimas décadas que estos criterios existen. Los trabajos pioneros de Berry y Bohigas, Giannoni y Schmit relacionaron las propiedades estadísticas del espectro de los sistemas cuánticos con el comportamiento caótico o regular de su análogo clásico. Desde entonces numerosos sistemas cuánticos u ondulatorios han sido analizados desde este punto de vista. Como ejemplos podemos citar los estudios sobre cicatrices cuánticas, billares cuánticos y su realización experimental como cavidades de microondas, cavidades acústicas, sistemas mesoscópicos, sistemas atómicos y moleculares o sistemas nucleares.

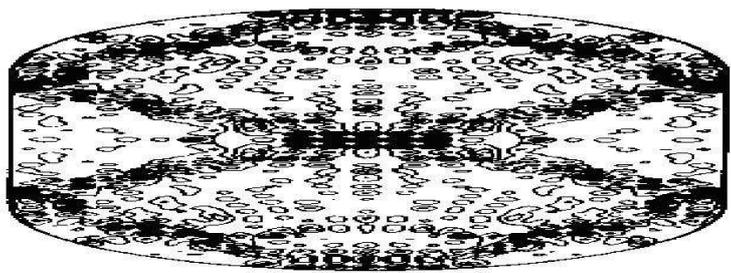


Figura 2: Cicatriz cuántica

Como se ha especificado anteriormente, podemos intuir que la idea del caos es la sensibilidad extrema del sistema a las condiciones iniciales, pero al situarnos ahora en el contexto de la mecánica cuántica, las variaciones en las trayecto-

rias dadas por el índice de Lyapunov, no tienen sentido. De forma automática, nuestra primera ocurrencia es asociar la trayectoria clásica a la función de onda de las partículas, y buscar una variación entre dos funciones de onda con condiciones iniciales muy similares, producida por la evolución del sistema, pero la evolución del sistema es unitaria debido a la linealidad de la ecuación de Schrodinger, por lo que se conserva el producto escalar en el espacio de Hilbert. Por tanto esta idea no nos ayuda a plantear el caos en el mundo cuántico. Sin embargo, podemos cambiar la sensibilidad extrema de las condiciones iniciales, por la del hamiltoniano, es decir, añadiendo perturbaciones al hamiltoniano original del sistema:

$$H = H_0 + \epsilon H_1 \quad (1)$$

De esta forma sí podemos llegar a estudiar el caos en sistemas cuánticos. Para un correcto estudio del hamiltoniano caótico debemos tener en cuenta las propiedades del espacio de fases del sistema. Para ello debemos prestar especial atención al Teorema KAM y al Principio de Incertidumbre de Heisenberg.

La posibilidad de definir el caos cuántico de forma rigurosa utilizando la sensibilidad a pequeños cambios del hamiltoniano no está suficientemente desarrollada todavía, ya que no existe una teoría general de la inestabilidad del hamiltoniano ante pequeñas perturbaciones, ya que cada hamiltoniano tiene propiedades distintas ante la misma perturbación.

3.3. Matrices Aleatorias

La Teoría de Matrices Aleatorias (RMT, Random Matrix Theory) fue diseñada por Wigner para tratar las estadísticas de los autovalores y autofunciones de sistemas cuánticos complejos. La idea principal es reemplazar el hamiltoniano del sistema que estamos estudiando por una colectividad de hamiltonianos aleatorios con las mismas propiedades de simetría. Las primeras aplicaciones de la RMT consistieron en explicar resultados de física nuclear. Mas tarde ha sido aplicada con éxito a las propiedades de las fluctuaciones espectrales en átomos y moléculas complejos. La observación de que los resultados de la RMT se aplican no sólo a sistemas complejos con muchos grados de libertad, sino también a sistemas con pocos grados de libertad pero con dinámica clásica caótica ha sido el origen fundamental de la disciplina del caos cuántico. La resolución de la ecuación de Schrodinger aplicada a los núcleos atómicos se enfrenta, principalmente, a dos problemas. Primeramente, no se conoce el hamiltoniano que representa al sistema, y, en segundo lugar, si se conociese, debido al alto número de nucleones que intervienen, sería muy complejo resolverlo. Wigner fue el primero en proponer que la distribución energética de los núcleos atómicos seguiría una secuencia idéntica a los autovalores de una matriz aleatoria. El primer cálculo sugirió que la cercanía entre distintos niveles es un caso extraño. Esto confirmó la hipótesis de Wigner, e indicó, que la densidad y el espaciamiento de los autovalores de matrices reales simétricas son independientes de muchos detalles de la distribución de los elementos individuales de la matriz. Todo lo que se requería era una distribución idéntica para los términos de la diagonal, siendo los no-diagonales simétricos y con la misma desviación cuadrática media. También se esperaban estos resultados para matrices hermíticas. Posteriormente, Bohigas, Giannoni y Schmit conjeturaron que el método podría aplicarse al espectro de cualquier sistema caótico.

3.4. Conjetura BGS

En 1984 Bohigas, Giannoni y Schmit (BGS) propusieron su famosa conjetura:

Las fluctuaciones del espectro de sistemas cuánticos invariantes bajo inversión temporal cuyos análogos clásicos son sistemas K, siendo K la forma más fuerte de dinámica caótica, son iguales a las predichas por el GOE.

Una versión más suave formulada por los mismos autores reemplaza los sistemas K por sistemas menos caóticos siempre que sean ergódicos. Para sistemas que no sean simétricos bajo inversión temporal el GOE se reemplaza por el GUE.

Todavía no se ha alcanzado una demostración satisfactoria de la conjetura BGS. Todos los intentos para demostrarla se basan en algún tipo de aproximación semiclassical, es decir, cuando $\hbar \rightarrow 0$. El primer y más exitoso intento de demostrar teóricamente la conjetura BGS lo realizó Berry en 1985.

3.5. Importancia de las simetrías

En mecánica cuántica, las simetrías dan lugar a la aparición de números cuánticos que caracterizan el sistema. Sea una función de onda que es posible expandir de la forma

$$\psi_n(x) = \sum_m a_{nm} \phi_m(x) \quad (2)$$

Con $\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}$. Si se introduce en la ecuación de autoenergías $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$, tenemos el problema de autovalores reducido a diagonalizar H_{nm} , ya que lo que queda es:

$$\sum_m H_{nm} a_m = E_n a_n \quad (3)$$

Sea ahora $R = R^+$, el operador autoadjunto asociado a una cantidad conservada, de forma que $R|\phi_{n,\alpha}\rangle = r_n|\phi_{n,\alpha}\rangle$. Al ser una simetría del sistema, $[H,R]=0$. Lo que permite diagonalizar el hamiltoniano por bloques. Si este procedimiento lo aplicamos al núcleo atómico, las simetrías del sistema que se utilizan son para clasificar las distintas cajas son las siguientes: I^Π y m_I . Y la energía siempre que no existan transiciones nucleares. Cada bloque del hamiltoniano estará asociado a I^Π , con una degeneración $2I + 1$, siempre que no existan campos magnéticos.

3.6. Análisis estadístico de los niveles

Para moldear la teoría, es preciso conocer primeramente los niveles energéticos. Esto se obtiene por espectroscopía. Una vez obtenidos los resultados:

- 1 Para un I^Π dado, se descomponen los niveles en subniveles. De forma que cada subespectro corresponde a autoestados de la submatriz I^Π .
- 2 El espectro se normaliza a una densidad media de estados, lo que permitirá comparar resultados con otros espectros y núcleos.
- 3 Se define $p(s)$ como la función de distribución de los espaciados entre los niveles energéticos E_n y E_{n-1} .

En contraste con sistemas integrables, aparecen agujeros a pequeñas distancias, lo que implica que los autoestados se repelen. La estructura de $p(s)$ se relacionará más tarde con la forma y características de las matrices.

3.7. Distribución de Poisson

Es el ejemplo de distribución más sencilla, ya que representa un núcleo integrable. De forma que la matriz ya adquiere estructura diagonal. Correspondiendo cada autovalor a una clase distinta de simetría. Es imprescindible asumir que los autovalores no están correlacionados, según Metha. Entonces, si las posiciones de las energías no están correlacionadas la probabilidad de que cualquier E_i se encuentre en el intervalo $[E; E + dE]$ es independiente de E y se corresponde a

$$\frac{1}{D} dE \quad (4)$$

Donde $D^{-1} = \rho$ es el número medio de niveles por unidad de intervalo de energía. La probabilidad de que exista un espaciamiento S , es decir, dado un nivel energético en E , la probabilidad de que no exista ningún nivel en el intervalo $[E, E + S]$ y uno en dS en el extremo del intervalo. Para ello se divide S en m partes iguales. Al ser los autoestados independientes, la probabilidad de no encontrar un nivel en $[E, E + S]$ es el producto de las probabilidades de no tener niveles en ninguna de estas partes, si $m \rightarrow \infty$, se llega a

$$\left[1 - \rho \frac{S}{m}\right]^m \rightarrow e^{-\rho S} \quad (5)$$

Ahora, la probabilidad de tener un nivel en $E+S$ es ρdS , y dado un nivel en E , la probabilidad de que no haya nivel en $[E, E + S]$ es $e^{-\rho S} \rho dS$, o en función de $t = \frac{S}{D} = \rho S$ queda:

$$p(t)dt = e^{-t} dt \quad (6)$$

Es la distribución de Poisson que es la probabilidad de densidad de espaciamiento entre niveles consecutivos. Se demuestra empíricamente que no se corresponde con los datos experimentales. Ya que para una separación entre niveles muy pequeña, la probabilidad de que exista otro nivel es también pequeña. Es lo que se ha comentado antes, repulsión entre autoestados.

3.8. Representación de los hamiltonianos

Que las energías del núcleo sigan una distribución análoga a los autovalores de las matrices aleatorias permite identificar el hamiltoniano con un grupo de matrices según sus simetrías. Es posible demostrar, pero muy complicado, que según sean las simetrías las distintas representaciones son:

- Hamiltoniano no invariante bajo inversión temporal se representa mediante una matriz hermítica invariante bajo transformaciones unitarias.
- Si el hamiltoniano si es invariante bajo inversión temporal, pero no admite representación de partículas con spin 1/2. Se tienen matrices reales invariantes bajo transformaciones ortogonales.
- Si es invariante temporalmente y representa partículas con spin 1/2, se usan cuaterniones (extensiones no conmutativas de los números complejos) invariantes bajo transformaciones simplécticas.

Las matrices aleatorias son la simplificación más potente del núcleo atómico, ya que sugiere que los detalles de la interacción no son relevantes para estudiar

las energías. Se ha pasado de intentar describir un sistema de forma detallada y completa, buscando fórmulas explícitas para las interacciones, a adquirir una visión global sin tener en cuenta detalles internos.

3.9. Distribución de Wigner

Aún cuando los datos experimentales no eran concluyentes, Wigner propuso las siguientes reglas para la distribución espacial:

- En secuencia de niveles con el mismo spin y paridad, la función de densidad de probabilidad para el espaciamiento viene dada por

$$p_m(t) = \frac{\pi}{2} t e^{-\frac{\pi t^2}{4}} \quad (7)$$

con $t=S/D$

- Los niveles con distinta paridad y spin no están correlacionados.

Esta distribución funcionaba mejor, ya que para pequeñas distancias sí representa la repulsión de niveles. Mientras que asintóticamente sí que se comporta como la de Poisson.

3.10. Definición del conjunto gaussiano de matrices

Como se ha explicado, han de representar las propiedades del hamiltoniano.

CONJUNTO ORTOGONAL

En este caso, la matriz es simétrica, con componentes reales. En la que existen $N(N+1)/2$ elementos independientes. Cualquier base vale, ya que únicamente importa la probabilidad correlacionada $p(H_{11}, \dots, H_{NN})$, donde $p(H_{jj})$ es la caja jj en la matriz. Como los elementos de la matriz H_{nm} son invariantes bajo transformaciones ortogonales, sólo pueden depender de la traza, luego dicha probabilidad también dependerá de la traza. Se exige que la probabilidad no esté correlacionada, es decir $p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = p(H_{11}) \dots p(H_{NN})$, después de arduos y complejos cálculos, se concluye que

$$p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{\frac{N(N+1)}{2}} e^{-\sum_{n,m} (H_{nm})^2} \quad (8)$$

Donde $\frac{1}{2A} = \langle H_{nm}^2 \rangle$. Esta distribución de los autovalores de las cajas es lo que se conoce como GOE.

CONJUNTO UNITARIO

En este caso, se impone que los elementos sean invariantes bajo transformaciones unitarias, obteniendo el conjunto GUE. También es posible llegar a expresiones como la anterior

$$p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{N(N+1)} e^{-\sum_{n,m} ((H_R)_{nm}^2 + (H_I)_{nm}^2)} \quad (9)$$

Siendo en este caso el exponente la parte real e imaginaria del hamiltoniano.

3.11. Función de correlación de autoenergías

Como se observa, estas expresiones son muy complejas y es complicado trabajar con ellas. Y es más interesante la correlación entre energías. De forma general, Metha concluye que la función de correlación para energías en los dos conjuntos gaussianos estudiados se puede expresar

$$p(E_1, \dots, E_N) \sim \prod_{n>m} (E_n - E_m)^\nu e^{-A \sum_n E_n^2} \quad (10)$$

Donde $\nu = 1, 2$, representa los sistemas ortogonales y los unitarios respectivamente. Si este parámetro es nulo no existe correlación. Hallar expresiones explícitas para densidades de estados es una tarea bastante compleja.

3.12. Correlación espectral

Anteriormente se han comentado las probabilidades de existencia de autoenergías en distintos intervalos para la distribución de Poisson y de Wigner. Es posible obtener expresiones semejantes para las dos expresiones comentadas, GOE y GUE, a partir de la distribución de autoenergías:

GUE

$$p(s) = \frac{32}{\pi^2} s^2 e^{-\frac{4s^2}{\pi}} \quad (11)$$

GOE

$$p(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi s^2}{4}} \quad (12)$$

Se puede observar que la segunda se corresponde con la distribución de Wigner.

3.13. Ley del semicírculo de Wigner

Ley que define la distribución de autovalores para un conjunto de matrices aleatorias reales, y un número muy alto N de autoenergías. Se puede demostrar, aunque es muy complejo, que la distribución de niveles, como histograma, tiene la forma universal para conjuntos gaussianos

$$\langle \rho(E) \rangle = \sqrt{1 - \left(\frac{\pi E}{2N}\right)^2} \quad (13)$$

Si $|E| < \frac{2N}{\pi}$, en caso contrario, la distribución es nula. No existen autoestados para autoenergías fuera del anterior semicírculo. Aplicándolo al núcleo atómico, la distribución de autoenergías tiene el mismo límite para núcleos con un número elevado de interacciones.

3.14. Caos Cuántico en sistemas de muchos cuerpos

En sistemas de muchos cuerpos no tenemos un límite clásico claro, ya que el principio de exclusión de Pauli y las estadísticas cuánticas juegan un papel preponderante. Para el análisis del caos cuántico en este tipo de sistemas no podemos basarnos en un estudio previo de su análogo clásico. Sin embargo, la estadística de las fluctuaciones de los niveles de energía y la estadística de

las funciones de onda nos proveen de herramientas apropiadas para estudiar el grado de caos y complejidad del sistema. Ya en el famoso artículo de N. Bohr sobre el núcleo compuesto se introducían conceptos estadísticos para explicar el comportamiento del núcleo a energías de excitación de varios MeV . Inspirado por esas ideas Wigner desarrolló la teoría de matrices aleatorias. La nueva física estadística de Wigner difiere de modo fundamental de la aplicación normal de los conceptos estadísticos. Wigner consideró colectividades de sistemas dinámicos gobernados por hamiltonianos distintos pero con una propiedad de simetría común. Se buscan propiedades genéricas, comunes a casi todos los miembros de la colectividad y que vengan determinadas únicamente por sus propiedades de simetría. Los resultados obtenidos se aplican a sistemas físicos individuales siempre que exista un teorema ergódico adecuado. La hipótesis ergódica utilizada es que el promedio sobre la colectividad es igual a un promedio sobre una sección suficientemente grande del espectro de casi cualquier miembro de la colectividad. En general, en sistemas de muchos cuerpos solamente tenemos clara una imagen semiclásica en la aproximación del campo medio. Cada una de las partículas (aunque en realidad se consideran cuasipartículas) que componen el sistema se mueven en el campo medio autoconsistente que crea el resto. Dependiendo de la simetría o ausencia de esta, el campo medio determina el movimiento regular o caótico de las partículas individuales. En el campo medio nuclear esférico, consistente esencialmente en un oscilador mas términos de superficie y el termino espín-orbita, los nucleones se mueven en órbitas de forma regular. Al añadir la interacción residual es cuando introducimos el caos en el sistema. La representación del campo medio, por tanto, permite el análisis de la transición del movimiento de cuasipartículas independiente y regular al movimiento complicado de los estados complejos. En este caso podemos calcular la complejidad de las funciones de onda de los estados de muchos cuerpos utilizando el concepto de localización en el espacio de Hilbert. Los hamiltonianos de muchos cuerpos, es decir, el caos cuántico, se estudia en átomos, moléculas y núcleos atómicos.

Parte II

POLINOMIOS ORTOGONALES EN LA TEORÍA DE MATRICES ALEATORIAS

4. INTRODUCCIÓN

Consideremos una familia de colectividades de matrices aleatorias definidas no por las distribuciones de probabilidad conjunta de sus elementos de matriz, sino por las de sus autovalores. La función de distribución presenta la siguiente expresión:

$$P(x_1, x_2, \dots, x_N) = \mathcal{N} \prod_{i=1}^N w(x_i) \prod_{i>j}^N (x_i - x_j)^2 \quad (14)$$

donde $w(x_i)$ a la que llamaremos función peso, definiendo ésta la colectividad en la que estamos trabajando. En particular, cuando $w(x_i) = e^{-x^2}$ define la colectividad GUE.

La idea principal es la de expresar la función de distribución de los autovalores como un determinante y aprovechar la potencia de la teoría de polinomios ortogonales, para determinar las propiedades de las diferentes colectividades que define $w(x)$.

4.1. La Distribución de Probabilidad como función de Polinomios Ortogonales

Sea C la matriz

$$C = \left(\int_I x^{p-1} x^{q-1} w(x) dx \right)_{p,q=1 \dots N} \quad (15)$$

La matriz C es real y simétrica, por lo que podemos garantizar que existe una transformación ortogonal B , de la forma $BCB^t = H$, siendo la matriz H diagonal. Podemos expresarlo como:

$$H_{kl} = \sum_{q,p=1}^N B_{kp} C_{pq} (B_{ql})^T = \int_I \left(\sum_{p=1}^N B_{kp} x^{p-1} \right) \left(\sum_{q=1}^N B_{lq} x^{q-1} \right) w(x) dx \quad (16)$$

Los polinomios ortogonales vienen definidos como:

$$f_{p-1}(x) = \sum_{k=1}^N B_{nk} x^{k-1} \quad (17)$$

Introduciendo la anterior en la expresión integral, llegamos a que:

$$H_{kl} = \int_I f_{k-1} f_{l-1} w(x) dx = h_k \delta_{kl} \quad (18)$$

A continuación, se intenta dar una expresión matricial de la función de distribución. Para ello, consideramos las siguientes matrices:

$$\Delta X = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ x_1 & \dots & x_N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^{N-1} & \dots & x_N^{N-1} \end{bmatrix} \quad W = \begin{bmatrix} \sqrt{w(x_1)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{w(x_2)} & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \sqrt{w(x_N)} \end{bmatrix}$$

$$P = \begin{bmatrix} f_0(x_1) & \dots & f_0(x_N) \\ f_1(x_1) & \dots & f_1(x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{N-1}(x_1) & \dots & f_{N-1}(x_N) \end{bmatrix}$$

La matriz W es la matriz de las funciones peso, mientras que la matriz ΔX recibe el nombre de matriz de VanDermonde, cuyos determinantes vienen dados por:

$$\det W = \prod_{i=1}^N \sqrt{w(x_i)} \quad (19)$$

$$\det \Delta X = \prod_{i>j} (x_i - x_j) \quad (20)$$

Ahora, se busca la forma de expresar ΔX en función de los polinomios ortogonales, lo cual es fácil, sin más que aplicar los resultados anteriores:

$$P = \Delta X B^T \Rightarrow \Delta X = B P \quad (21)$$

donde debemos recordar que $B^T = B^{-1}$ por ser B ortogonal. Por lo tanto:

$$\det \Delta X = \det(B P) \Rightarrow \det \Delta X^T = \det(P^T B^T) \quad (22)$$

Ahora, podemos reescribir el factor $\prod_{i>j}^N (x_i - x_j)^2$ en forma de determinante como:

$$\prod_{i>j}^N (x_i - x_j)^2 = \det(\Delta X^T \Delta X) = \det(P^T B^T B P) = \det(P^T P) \quad (23)$$

Finalmente, podemos expresar la función de distribución conjunta en forma de determinante, sin más que introducir la matriz W junto con la expresión anterior:

$$P(x_1, x_2, \dots, x_N) = \mathcal{N} \det[(W B P)^T (W B P)] = \mathcal{N} \det(F^T F) = \mathcal{N} \det(\mathbb{F}) \quad (24)$$

donde $F = W P$ y $\mathbb{F} = F^T F$, es decir, $\mathbb{F}_{jk} = (F^T F)_{jk} = \sum_i^N F_{ij} F_{ik}$ y se cumple que $F_{ij} = \sqrt{w(x_i)} f_{i-1}(x_j)$, por tanto

$$\mathbb{F}_{jk} = \sum_{i=1}^N w(x_i) f_{i-1}(x_j) f_{i-1}(x_k) \quad (25)$$

4.2. Introducción de las Variables de Grassmann

Al expresar la función de distribución conjunta como un determinante, nos va a generar problemas a la hora de calcular diferentes integrales que han de realizarse a posteriori para obtener las distintas propiedades de la colectividad. Estos problemas que dan resueltos de una forma elegante introduciendo las variables de Grassmann.

Sea un conjunto de variables $\eta_i, i = 1 \dots N$, son antisimétricas si cumplen que:

$$\eta_i \eta_j + \eta_j \eta_i = 0; \forall i, j \quad (26)$$

Presentan las siguiente propiedades:

$$\int d\eta = 0$$

$$\int \eta d\eta = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\iint \eta_i \eta_j d\eta_i d\eta_j = - \iint \eta_i d\eta_i \eta_j d\eta_j = \frac{1}{2\pi}$$

Consideremos ahora la siguiente matriz A_{jk} n x n no degenerada. El determinante de la matriz A, podemos obtenerlo mediante una integración sobre variables de Grassmann como sigue:

$$I = \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) e^{-\eta^+ A \eta} \quad (27)$$

donde $\eta^+ A \eta = \sum_{j,k} \eta_j^* A_{jk} \eta_k$ y $e^{-\eta^+ A \eta} = \sum_{n=0}^N \frac{(-1)^n}{n!} (\eta^+ A \eta)^n$. Introduciendo esto en la integral I y desarrollando, llegamos a la siguiente relación:

$$I = \frac{\det A}{(2\pi)^N} \Rightarrow \det A = (2\pi)^N I \quad (28)$$

Sea A nuestra matriz \mathbb{F} . Si aplicamos la relación anterior y haciendo uso de la ecuación (25), se concluye que:

$$\det \mathbb{F} = (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \prod_{l=1}^N \left[- \sum_{j,k} \eta_j^* \eta_k w(x_l) f_{l-1}(x_j) f_{l-1}(x_k) \right] \quad (29)$$

4.3. Determinación de la constante de normalización \mathcal{N}

La constante de normalización, la obtenemos al obtener que la función de distribución conjunta se encuentre normalizada a la unidad, esto es

$$\int \left(\prod_{i=1}^N d x_i \right) P(x_1, \dots, x_N) = \mathcal{N} I_{0,N} = 1 \quad (30)$$

donde $I_{0,N} = \int \left(\prod_{i=1}^N d x_i \right) \prod_{i=1}^N w(x_i) \prod_{i>j} (x_i - x_j)^2$. Por tanto, $\mathcal{N} = I_{0,N}^{-1}$, por lo que debemos realizar la evaluación de esta integral, lo cual lo hacemos de forma matricial como adelantabamos anteriormente. El proceso es el siguiente:

$$I_{0,N} = \int \left(\prod_{i=1}^N d x_i \right) \det(\mathbb{F}) \quad (31)$$

Ahora bien, recordando que

$$\det \mathbb{F} = (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \prod_{l=1}^N \left[- \sum_{j,k} \eta_j^* \eta_k w(x_l) f_{l-1}(x_j) f_{l-1}(x_k) \right]$$

y sustituyendola en la anterior, obtenemos que:

$$I_{0,N} = \int \left(\prod_{i=1}^N dx_i \right) (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \prod_{l=1}^N \left[- \sum_{j,k} \eta_j^* \eta_k w(x_l) f_{l-1}(x_j) f_{l-1}(x_k) \right]$$

Para efectuar la siguiente integral, procedemos en dos pasos, donde el primero de ellos será aplicar las propiedades de los polinomios ortogonales para simplificar la integral, para finalmente realizar la integración sobre las variables de Grassmann. Recordando que $\int_I f_{k-1} f_{l-1} w(x) dx = h_k \delta_{kl}$, con lo cual:

$$\begin{aligned} I_{0,N} &= (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \prod_{l=1}^N \left[- \sum_j \eta_j^* \eta_j h_{j-1} \right] \\ &= (-1)^N (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \left(\sum_j \eta_j^* \eta_j h_{j-1} \right)^N \end{aligned}$$

Cada uno de los N factores idénticos en el integrando que no dan contribución nula a la integral, deben proveer un par diferente $\eta_i^* \eta_i$, y como cada par conmuta, habrá N! contribuciones de los mismos, esto es:

$$\begin{aligned} I_{0,N} &= (-1)^N (2\pi)^N N! \prod_{j=1}^N h_{j-1} \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \eta_i^* \eta_i \right) = \\ &= (-1)^N (2\pi)^N N! \prod_{j=1}^N h_{j-1} \frac{(-1)^N}{(2\pi)^N} \end{aligned}$$

Recordando que la matriz H_{jk} es diagonal, por lo que su determinante será:

$$\det(H) = \prod_{j=1}^N h_{j-1} \quad (32)$$

Podemos escribir de forma más compacta la expresión de $I_{0,N}$ como

$$I_{0,N} = N! \prod_{j=1}^N h_{j-1} = N! \det(H) \quad (33)$$

Por tanto, ya tenemos la constante de normalización, sin más que invertir la anterior, es decir:

$$\mathcal{N} = \frac{1}{N! \det(H)} \quad (34)$$

Con todo esto, podemos expresar la distribución de probabilidad conjunta en forma de determinantes de una forma compacta como:

$$P(x_1, \dots, x_N) = \frac{\det(\mathbb{F})}{N! \det(H)} \quad (35)$$

4.4. Densidad de autovalores

Definamos la forma más general de la función de correlación a n-puntos

$$R_n(E_1, \dots, E_N) = \frac{N!}{(N-n)!} \int_I \left(\prod_{i=1}^N dE_i \right) P(E_1, \dots, E_N) \quad (36)$$

de la cual podremos obtener diferentes propiedades de la colectividad que estemos considerando. Así, podemos obtener, en primer lugar, la densidad de autovalores, que viene definida como:

$$\overline{g(E)} = \sum_{i=1}^N \overline{\delta(E - x_i)} = R_1(E) = \frac{N!}{(N-1)!} \int \left(\prod_{i=2}^N dx_i \right) P(E, x_2, \dots, x_N)$$

que utilizando nuestra expresión en forma matricial, sería

$$\overline{g(E)} = \frac{1}{(N-1)! \det(H)} \int \left(\prod_{i=2}^N dx_i \right) \det(\mathbb{F})_{x_1=E} \quad (37)$$

Seguimos los mismos pasos que en el apartado anterior, es decir,

$$\overline{g(E)} = \frac{1}{(N-1)! \det(H)} I_{1, N-1} \quad (38)$$

siendo $I_{1, N-1} = \int \left(\prod_{i=2}^N dx_i \right) \det(\mathbb{F})_{x_1=E}$. Operamos para calcular $I_{1, N-1}$, introduciendo la expresión de $\det(\mathbb{F})$, de tal forma

$$\begin{aligned} I_{1, N-1} &= \int \left(\prod_{i=2}^N dx_i \right) (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \prod_{l=1}^N \left[- \sum_{j,k} \eta_j^* \eta_k w(x_l) f_{l-1}(x_j) f_{l-1}(x_k) \right] \\ I_{1, N-1} &= (-1)^N (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=2}^N dx_i \right) \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \left(\sum_{j,k} w(x_1) f_{j-1}(x_1) f_{k-1}(x_1) \eta_j^* \eta_k \right) \\ &\quad \prod_{l=2}^N \left[\sum_{j,k} \eta_j^* \eta_k w(x_l) f_{l-1}(x_j) f_{l-1}(x_k) \right] \end{aligned}$$

Utilizando las propiedades de los polinomios ortogonales, integramos en las variables reales, para obtener que:

$$I_{1, N-1} = (-1)^N (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \left(\sum_{j,k} w(x_1) f_{j-1}(x_1) f_{k-1}(x_1) \eta_j^* \eta_k \right) \prod_{l=2}^N \left[\sum_{j,k} \eta_j^* \eta_k h_{k-1} \right]$$

Sea $j \in (1, 2, \dots, N)$ y $J = (j_1, j_2, \dots, j_N)$ con $j_i \neq j$ una permutación (Q) cualquiera de $(1, 2, \dots, j_i, \dots, N) \rightarrow (Q)(j_3, j_2, \dots, j_N)$. Lo utilizamos para llegar a las contribuciones no nulas de las variables de Grassmann, con lo que

$$I_{1, N-1} = (-1)^N (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \left(\sum_{j=1}^N w(x_1) f_{j-1}(x_1) f_{j-1}(x_1) \eta_j^* \eta_k \right) \left(\sum_J \prod_{l=2}^N \eta_{j_l}^* \eta_{j_l} h_{j_l-1} \right)$$

$$I_{1, N-1} = (-1)^N (2\pi)^N (N-1)! \prod_{l=2}^N h_{j-1} \sum_{j=1}^N w(x_1) f_{j-1}(x_1) f_{j-1}(x_1) \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \eta_j^* \eta_j \right)$$

finalmente, llegamos

$$I_{1, N-1} = (N-1)! \prod_{l=2}^N h_{j-1} \sum_{j=1}^N w(x_1) f_{j-1}(x_1) f_{j-1}(x_1) \quad (39)$$

Sustituyendo en la expresión de la densidad de la energía, llegamos a que esta vale:

$$\overline{g(E)} = w(E) \sum_{j=1}^N \frac{f_{j-1}(E) f_{j-1}(E)}{h_{j-1}} \quad (40)$$

Intentaremos simplificarla utilizando la formula de sumación de Christoffel-Darboux:

$$\sum_{j=1}^N \frac{f_{j-1}(x_1) f_{j-1}(x_2)}{h_{j-1}} = \frac{B_N}{B_N + 1h_{N-1}} \frac{f_N(x_1) f_{N-1}(x_2) - f_{N-1}(x_1) f_N(x_2)}{x_1 - x_2}$$

Se ve a simple vista que para poder aplicar la anterior, las variables han de ser de diferentes. Para salvar este pequeño obstáculo, procedemos como sigue:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \frac{f_{j-1}(E) f_{j-1}(E)}{h_{j-1}} &= \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \sum_{j=1}^N \frac{f_{j-1}(E + \Delta E) f_{j-1}(E)}{h_{j-1}} = \\ &= \frac{B_N}{B_N + 1h_{N-1}} \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \frac{f_N(E + \Delta E) f_{N-1}(E) - f_{N-1}(E + \Delta E) f_N(E)}{\Delta E} = \\ &= \frac{B_N}{B_N + 1h_{N-1}} \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \left(f_N'(E) f_{N-1}(E) - f_{N-1}'(E) f_N(E) + 0(\Delta E) \right) \end{aligned}$$

Finalmente, la expresión simplificada de la densidad de energías será:

$$\overline{g(E)} = w(E) \frac{B_N}{B_N + 1h_{N-1}} \left(f_N'(E) f_{N-1}(E) - f_{N-1}'(E) f_N(E) \right) \quad (41)$$

4.4.1. Aplicación a Diferentes colectividades

Vamos a tratar aquí dos tipos de colectividades, cada una caracterizada por su función peso, para obtener la densidad de energía en ambas. Trataremos con los polinomios de Hermite que nos definía la colectividad GUE y los polinomios de Laguerre que nos definirá la Ley de Marcenko-Pastur.

POLINOMIOS DE HERMITE

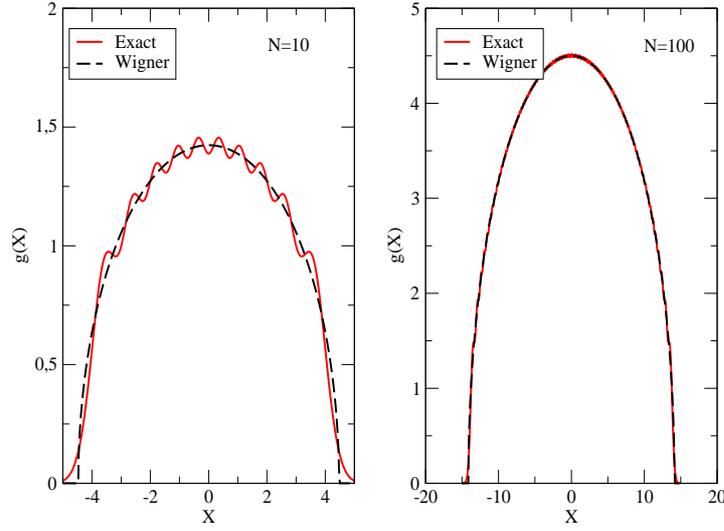


Figura 3: Comparación de la densidad media exacta con la ley de Wigner para $N=10$ y $N=100$

Los polinomios de Hermite definen la colectividad GUE, donde la función de distribución conjunta viene dada por:

$$P(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\left[\left(2^N \frac{\pi}{2} \right)^{\frac{N}{2}} \left(\prod_{n=1}^N n! \right) \right]} e^{-\sum x_n^2} \prod_{i>j}^N (x_i - x_j)^2 \quad (42)$$

Definamos los parámetros característicos de este tipo de polinomios:

$$\text{Función peso } w(E) = e^{-E^2}$$

$$\text{Normalización } h_n = \sqrt{\pi} 2^n n!$$

$$\text{Coeficientes } Bn = 2^n$$

Llevando estos parámetros a la expresión de $\overline{g(E)}$

$$\overline{g(E)} = \frac{e^{-E^2}}{\sqrt{\pi}2^{N-1}(N-1)!} (NH_{N-1}^2(E) - (N-1)H_{N-2}(E)H_N(E)) \quad (43)$$

Podemos expresar la anterior en función de las autofunciones del oscilador como:

$$\overline{g(E)} = N\phi_{N-1}^2(E) - \sqrt{N(N-1)}\phi_{N-2}(E)\phi_N(E) \quad (44)$$

siendo

$$\phi_n(E) = \sqrt{\frac{\alpha e^{-E^2}}{\sqrt{\pi}2^{n-1}(n-1)!}},$$

y $\alpha = 1$.

En las figuras de la página precedente representamos la densidad de energía obtenida comparada con la de Wigner o ley del semicírculo. Como se observa, al aumentar el número de autovalores, más y mejor se aproxima la densidad real al límite asintótico que no es otro que la densidad de Wigner.

POLINOMIOS DE LAGUERRE

Los polinomios de Laguerre definen la colectividad de Wishart, cuyo valor en el límite asintótico es la ley de Marcenko-Pastur, donde la densidad de autovalores viene dada por:

$$\overline{g(E)} = \frac{1}{2\pi E} \sqrt{(4(N+p) - E) \left(E - \frac{p^2}{4(N+p)} \right)} \quad (45)$$

La ley de Marcenko-Pastur obtiene la distribución de autovalores de ciertas matrices de la forma $M = R^T R$, siendo R_{N+p} . Definamos los parámetros característicos de este tipo de polinomios:

$$\text{Función peso } w(E) = e^{-E}$$

$$\text{Normalización } h_n = 1$$

$$\text{Coeficientes } B_n = \frac{(-1)^n}{n!}$$

Llevando estos parámetros a la expresión de $\overline{g(E)}$

$$\overline{g(E)} = -Ne^{-E} (NL_{N-1}^2(E) - (N-1)L_{N-2}(E)L_N(E)) \quad (46)$$

En las siguientes figuras, representamos la densidad de energía obtenida para la colectividad Wishart comparada con la de Marcenko-Pastur. Como se observa, al aumentar el número de autovalores, la densidad real se aproxima más al límite asintótico.

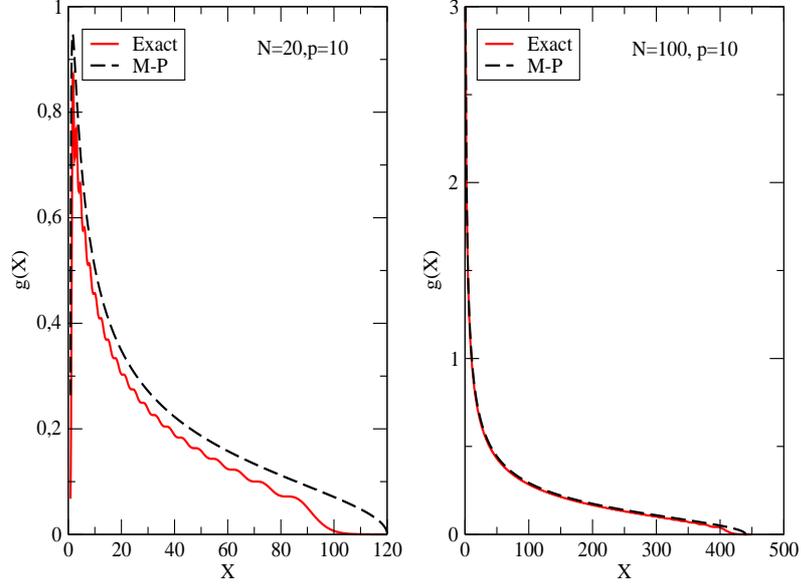


Figura 4: Comparación de la densidad media exacta con la ley de Marcenko-Pastur para $N=20, p=10$ y $N=100, p=10$

4.5. Funciones de Correlación

Ya definimos en el capítulo anterior la función mas general de correlación a n -puntos, que venía dada por

$$R_n(E_1, \dots, E_N) = \frac{N!}{(N-n)!} \int_I \left(\prod_{i=1}^N dE_i \right) P(E_1, \dots, E_N) \quad (47)$$

LLevando nuestra función de distribución conjunta a la anterior, obtendremos la función de correlaciones a n -puntos. Sin más preámbulo,

$$R_n(x_1, \dots, x_n) = \frac{N!}{(N-n)!} \int \left(\prod_{i=n+1}^N dx_i \right) P(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (48)$$

que utilizando nuestra expresión en forma matricial, sería

$$R_n(x_1, \dots, x_n) = \frac{(-1)^N (2\pi)^N \prod_{i=1}^N w(x_i)}{(N-1)! \det(H)} \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \prod_{l=1}^n \left[\sum_{j,k} \eta_j^* \eta_k w(x_l) f_{j-1}(x_l) f_{k-1}(x_l) \right]$$

$$\prod_{l=n+1}^N \left[\sum_{j,k} \eta_j^* \eta_k \int \left(\prod_{i=n+1}^N dx_i \right) w(x_l) f_{j-1}(x_l) f_{k-1}(x_l) \right]$$
(49)

Seguimos los mismos pasos que anteriormente, es decir, las propiedades de los polinomios ortogonales e introduciendo dos numeraciones de índices:

$$J = (j_1, j_2, \dots, j_N)$$

$$J' = (j'_{n+1}, j'_{n+2}, \dots, j'_N)$$

Lo que hacemos realmente es introducir un operador de permutación \widehat{P} , a modo de que

$$\widehat{P}(j_1, j_2, \dots, j_N) \rightarrow (P_1, P_2, \dots, P_N)$$

operamos para llegar finalmente a la expresión de la función de correlación

$$R_n(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n w(x_i) \sum_J \sum_{\widehat{P}} (-1)^{\widehat{P}} \prod_{i=1}^n \frac{f_{j_i-1}(x_i) f_{p_i-1}(x_i)}{h_{j_i-1}}$$

donde debemos hacer dos aclaraciones importantes:

- 1) Podemos reordenar el producto a modo de que los polinomios $f_{p_i-1}(x_i)$ sigan el mismo orden que los polinomios $f_{j_i-1}(x_i)$

$$\prod_{i=1}^n w(x_i) \frac{f_{j_i-1}(x_i) f_{p_i-1}(x_i)}{h_{j_i-1}} = \prod_{i=1}^n w(x_i) \frac{f_{j_i-1}(x_i) f_{j_i-1}(x_{q_n})}{h_{j_i-1}}$$

donde el operador $\widehat{Q} = \widehat{P}^{-1}$, siendo ambas fases iguales, con lo que

$$R_n(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n w(x_i) \sum_J \sum_{\widehat{Q}} (-1)^{\widehat{Q}} \prod_{i=1}^n w(x_i) \frac{f_{j_i-1}(x_i) f_{j_i-1}(x_{q_n})}{h_{j_i-1}}$$

- 2)

$$R_n(x_1, \dots, x_n) = \sum_{(j_1, \dots, j_N)}^{1 \dots N} \sum_{\widehat{Q}} (-1)^{\widehat{Q}} \prod_{i=1}^n \frac{f_{j_i-1}(x_i) f_{j_i-1}(x_{q_n})}{h_{j_i-1}} =$$

$$= \sum_{\widehat{Q}} (-1)^{\widehat{Q}} \prod_{i=1}^n \frac{f_{j-1}(x_i) f_{j-1}(x_{q_n})}{h_{j_i-1}}$$

Donde en el miembro de la izquierda solamente aparecen contribuciones $j_i \neq j_k$ que son las únicas reales. En el miembro de la derecha aparecen contribuciones $j_i = j_k$, pero se anulan dos a dos.

Podemos simplificar aún más la expresión final, si definimos

$$G(x_k, x_l) = w(x_k) \sum_{j=1}^N \frac{f_{j-1}(x_k) f_{j-1}(x_l)}{h_{j-1}} = G(x_l, x_k) \quad (50)$$

donde por supuesto cuando $x_1 = x_2$, obtenemos la densidad de autovalores calculada anteriormente. A la anterior, podemos aplicar también la fórmula de sumación de Cristoffel-Darboux, en particular, sean $k=1$ y $l=2$, es decir, $x_1 \neq x_2$

$$G(x_k, x_l) = \frac{B_N}{B_{N+1} h_{N-1}} \frac{f_N(x_1) f_{N-1}(x_2) - f_{N-1}(x_1) f_N(x_2)}{x_1 - x_2}$$

Con esta definición, podemos rescribir la función de correlación como

$$R_n(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^N w(x_i) \sum_{\hat{Q}} (-1)^{\hat{Q}} \prod_{i=1}^n \sum_{j=1}^N \frac{f_{j-1}(x_i) f_{j-1}(x_{q_n})}{h_{j_i-1}} \quad (51)$$

y simplificando aún mas, de una modo más compacto, como

$$R_n(x_1, \dots, x_n) = \det(G(x_k, x_l)) \quad (52)$$

Podemos obtener de la anterior, la función de correlación a dos puntos y su correspondiente función de acumulación, ambas de particular interés

$$R_2(x_1, x_2) = \det(G(x_1, x_2)) = \overline{g(x_1)g(x_2)} - \left(\overline{G(x_1, x_2)} \right)^2 \quad (53)$$

$$C_2(x_1, x_2) = \overline{g(x_1)g(x_2)} - C_2(x_1, x_2) = \left(\overline{G(x_1, x_2)} \right)^2 \quad (54)$$

4.6. Funciones de Correlación reescaldas

4.6.1. Unfolding o reescalado del espectro

Se acepta como un hecho universal que la densidad de estados de un sistema puede separarse en una parte suave y en una fluctuante

$$g(x) = g^{(s)}(x) + g^{(f)}(x) \quad (55)$$

En general, la amplitud de las fluctuaciones de la parte oscilante vienen modificadas por el valor de $g^{(S)}$. Como $g^{(S)}$ depende mucho del sistema que estemos estudiando, su influencia en la parte fluctuante debe ser eliminada si queremos comparar fluctuaciones de distintos sistemas o incluso las fluctuaciones de dos partes bien diferenciadas de un mismo espectro.

El proceso de eliminación de la oscilación de $g^{(S)}$ recibe el nombre de unfolding y consiste en una transformación local de escala dada por

$$x \rightarrow \lambda(x) = F^{(S)}(x) + cte \quad (56)$$

donde $F(x) = \int_{-\infty}^x g(u) du$ es la función de distribución que proporciona el número total de autovalores o estados de energía hasta un valor x , obviamente $F^{(S)}(x) = \int_{-\infty}^x g^{(S)}(u) du$. Puede demostrarse que en la nueva escala la densidad suave es constante igual a la unidad

$$g^{(S)}(x) \rightarrow^{x \rightarrow \lambda} \rho^{(S)}(\lambda) = 1 \quad (57)$$

4.6.2. El unfolding en la Teoría de Matrices Aleatorias (TMA)

Vamos a suponer que la parte suave de la densidad de todos los miembros de una colectividad es la misma y que además viene dada por el promedio de $\overline{g(x)}$ sobre la colectividad, es decir

$$g^{(S)}(x) = \overline{g(x, N)}$$

$$F^{(S)}(x) = F^{(S)}(x, N) = \int_{-\infty}^x g^{(S)}(u, N) du$$

Bajo el cambio de escala $x \rightarrow \lambda(x)$ las funciones de correlación y de clusterización se transforman con

$$R(x_1, x_2, \dots, x_N) \rightarrow^{\lambda(x)=F^{(S)}(x)+cte} \left(\prod_{k=1}^n \frac{1}{g(x_k)} \right) R(x_1(\lambda_1), x_2(\lambda_2), \dots, x_N(\lambda_N)) \quad (58)$$

donde $x(\lambda)$ es la función inversa de $\lambda(x) = \overline{F(x)}$. La función de clusterización cambia análogamente a la de correlación. Cuando trabajamos con espectros individuales, obtenidos experimentalmente o numéricamente, el número de estados conocidos es casi siempre pequeño por lo que no podemos desechar ninguno. En TMA siempre se considera el límite $N \rightarrow \infty$ por lo que podemos centrar nuestra atención en un pequeño intervalo $(x_0 - \Delta, x_0 + \Delta)$ tal que:

- 1 El número de niveles contenido en dicho intervalo verifique que $1 \ll m \ll N$ cuando $N \rightarrow \infty$.
- 2 La densidad $g(x)$ sea esencialmente constante en el intervalo considerado.

Siempre podemos elegir la constante de forma que

$$\lambda(x) - x_0 = \overline{F(x)} - \overline{F(x_0)} = \int_{x_0}^x \overline{g(u)} du$$

siempre que se cumpla $x \in (x_0 - \Delta, x_0 + \Delta)$.

$$\overline{g(x)} = \overline{g(x_0)} + \overline{g'(x_0)}(x - x_0) + \dots = \overline{g(x_0)} \left(1 + \frac{\overline{g'(x)}}{\overline{g(x)}}(x - x_0) + \dots \right)$$

donde debe imponerse que $\frac{\overline{g'(x)}}{\overline{g(x)}} \Delta \ll 1$ para que $\overline{g(x)}$ sea cuasiconstante en el intervalo. Así

$$\lambda(x) - x_0 = \int_{x_0}^x \overline{g(u)} du = \overline{g(x_0)}(x - x_0) \quad (59)$$

entonces $\frac{d\lambda}{dx} = \overline{g(x_0)}$ y cuando $N \gg 1$ denotaremos a la anterior como g_0 .

Con esto, conseguimos que las funciones de correlación y clusterización queden como:

$$R_N(x_1, x_2, \dots, x_N) \rightarrow_{N \gg 1}^{\lambda} \frac{1}{g_0^N} R_N\left(\frac{\lambda_1}{g_0}, \frac{\lambda_2}{g_0}, \dots, \frac{\lambda_N}{g_0}\right) \quad (60)$$

$$C_N(x_1, x_2, \dots, x_N) \xrightarrow{x \rightarrow \lambda} \frac{1}{g_0^N} C_N\left(\frac{\lambda_1}{g_0}, \frac{\lambda_2}{g_0}, \dots, \frac{\lambda_N}{g_0}\right) \quad (61)$$

Estas funciones que juegan un papel clave en TMA se denotan de forma espacial como:

$$T_N(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{g_0^N} R_N\left(\frac{\lambda_1}{g_0}, \frac{\lambda_2}{g_0}, \dots, \frac{\lambda_N}{g_0}\right) \quad (62)$$

$$Y_N(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{g_0^N} C_N\left(\frac{\lambda_1}{g_0}, \frac{\lambda_2}{g_0}, \dots, \frac{\lambda_N}{g_0}\right) \quad (63)$$

Colectividad GUE

Hagamos un breve recordatorio

- 1) Los polinomios característicos de esta colectividad son los polinomios de Hermite
- 2) La forma asintótica de la densidad promedio viene dada por la ley del semicírculo

$$\overline{g(x)} = \overline{g(x)} \sim^{N \gg 1} \frac{1}{\pi} \sqrt{2N - x^2} |x| < 2N$$

$$\overline{g(x)} \sim 0 |x| > 2N$$

Elegimos $x_0 = 0$ lo que implica que el intervalo básico con m autovalores está en la región central del espectro. Desarrollando la densidad media

$$\overline{g(x)} \sim \sqrt{\frac{2N}{\pi^2}} - \frac{1}{2\pi} \frac{x^2}{\sqrt{2N}} + \dots = \sqrt{\frac{2N}{\pi^2}} \left[1 - \frac{\pi}{2} \frac{x^2}{2N} + \dots \right]$$

con el fin de que la densidad sea asintóticamente

$$\overline{g(x)} \sim \overline{g(0)} = \sqrt{\frac{2N}{\pi^2}} \quad (64)$$

la anchura del intervalo debe cumplir que $\frac{\Delta}{\sqrt{2N}} \ll 1$. De todo lo anterior, se concluye que

$$\lambda(x) = \overline{g(0)}x = \sqrt{\frac{2N}{\pi^2}}x \quad (65)$$

y se cumple que $x \ll \sqrt{2N} \Rightarrow \lambda \ll 2N$. Las expresiones de correlación y clusterización son:

$$T_N(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \left(\frac{\pi^2}{2N}\right)^2 R\left(\frac{\pi\lambda_1}{\sqrt{2N}}, \frac{\pi\lambda_2}{\sqrt{2N}}, \dots, \frac{\pi\lambda_N}{\sqrt{2N}}\right) \quad (66)$$

$$Y_N(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \left(\frac{\pi^2}{2N} C\left(\frac{\pi\lambda_1}{\sqrt{2N}}, \frac{\pi\lambda_2}{\sqrt{2N}}, \dots, \frac{\pi\lambda_N}{\sqrt{2N}}\right)\right) \quad (67)$$

En particular, calcularemos la función de clusterización en el límite asintótico, es decir, bajo unfolding.

$$Y_N(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = e^{\frac{\pi^2 \lambda_1}{N}} \left[\frac{H_N\left(\frac{\pi\lambda_1}{\sqrt{2N}}\right) H_{N-1}\left(\frac{\pi\lambda_2}{\sqrt{2N}}\right) - H_{N-1}\left(\frac{\pi\lambda_1}{\sqrt{2N}}\right) H_N\left(\frac{\pi\lambda_2}{\sqrt{2N}}\right)}{\sqrt{\pi} 2^N (N-1)! (\lambda_1 - \lambda_2)} \right]^2 \quad (68)$$

Supongamos que $N=2m+1$ siendo $m \in \mathbb{N}, m \gg 1$ (si $N=2m$ se resuelve de igual forma). Además, como $\lambda \ll N$ podemos aproximar la exponencial a la unidad. Las ecuaciones de los polinomios de Hermite en el límite asintótico son:

$$H_{2m}\left(\frac{\pi\lambda}{2\sqrt{m}}\right) \sim \frac{4^m m!}{(-1)^m \sqrt{m\pi}}$$

$$H_{2m+1}\left(\frac{\pi\lambda}{2\sqrt{m}}\right) \sim (-1)^m \frac{4^m m!}{\sqrt{\pi}} 2\text{sen}(\pi\lambda)$$

Desarrollando las anteriores y utilizando la aproximación de Stirling, obtenemos sin más que

$$Y_2(\lambda_1, \lambda_2) = \left(\frac{\text{sen}(\pi(\lambda_1 - \lambda_2))}{\pi(\lambda_1 - \lambda_2)}\right)^2 = \left(\frac{\text{sen}(\pi E)}{\pi E}\right)^2 \quad (69)$$

De la cual obtendremos por supuesto la función de correlación, que será

$$R_2(E) = 1 - Y_2(E) = 1 - \left(\frac{\text{sen}(\pi E)}{\pi E}\right)^2 \quad (70)$$

Ambas quedan representadas en las siguientes figuras

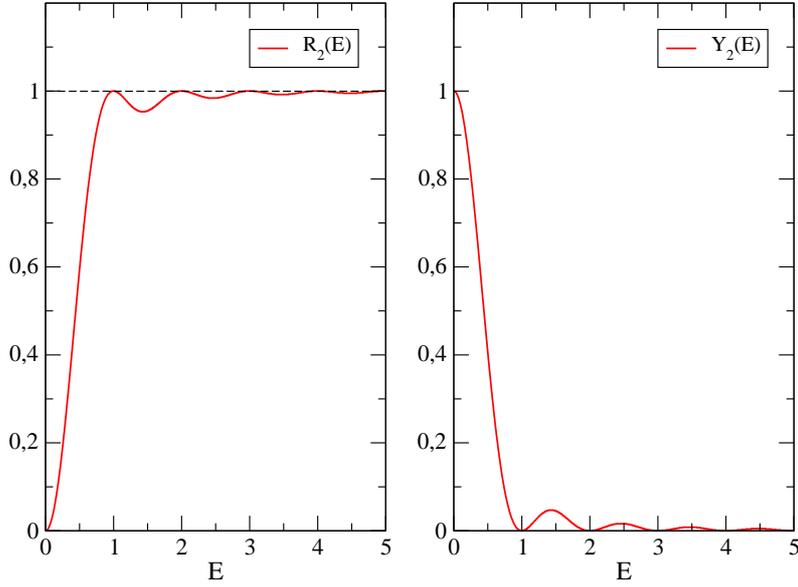


Figura 5: Funciones de correlación y clusterización en el GUE

5. CONCLUSIONES

Se buscaba en este trabajo obtener un método compacto y general para obtener las diferentes propiedades de diversas colectividades definidas mediante una serie de funciones peso, que a su vez reproducen las condiciones de simetría de ciertos sistemas regidos por matrices aleatorias.

En particular se han reproducido las propiedades de la colectividad GUE, obteniendo resultados óptimos, en total acuerdo con la ley de Wigner, por ejemplo. La colectividad Wishart, que viene definida en el límite asintótico por la Ley de Marcenko-Pastur, donde también se han llegado a los resultados esperados. Ésta tiene una gran relevancia en análisis de datos financieros, y recientemente se utilizaba en un modelo inflacionario para obtener el espectro de masas en el artículo *Random Matrices and the Spectrum of N -flation* (<http://arxiv.org/abs/hep-th/0512102v3>).

El método desarrollado puede aplicarse a otras colectividades complejas definidas por polinomios ortogonales, como los polinomios de Jacobi asociados a la colectividad Manova, o a otros polinomios como los de Chebyshev o Legendre, en caso de que nos interesase. Nos hubiera gustado obtener las funciones de correlación de la colectividad de Wishart y también una expresión cerrada para la distribución de espaciamientos de las colectividades complejas.

Podemos terminar diciendo, que se ha obtenido un método general, elegante y compacto aplicable a cualquier colectividad de matrices aleatorias complejas, que nos permite obtener las diferentes propiedades de la misma. En el futuro se intentará extender el método a colectividades de matrices reales o de cuaterniones.

Referencias

- [1] Quantum Signatures of Chaos, Fritz Haake(Springer).
- [2] Quantum Chaos, an introduction, H-J Stöckmann (Cambridge University Press, 1999)
- [3] Random Matrices, Metha (1963)
- [4] *Handbook of Mathematical Formulas* (Eds. M Abramowitz and I. A. Stegun, Dover Publications, N. Y., 1972).
- [5] J. Wishart, *Biometrika* **A** 10, 32 (1928).

Apéndice 1. Variables de Grassmann

Vamos a obtener aquí la relación (28). Consideremos la siguiente matriz A_{jk} $n \times n$ no degenerada. El determinante de la matriz A , podemos obtenerlo mediante una integración sobre variables de Grassmann. Para ello partimos definiendo la integral I como

$$I = \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) e^{-\eta^+ A \eta}$$

donde $\eta^+ A \eta = \sum_{jk} \eta_j^* A_{jk} \eta_k$ y $e^{-\eta^+ A \eta} = \sum_{n=0}^N \frac{(-1)^n}{n!} (\eta^+ A \eta)^n$. Introducimos estas definiciones en la integral I , donde se desarrolla la exponencial en serie de potencias, donde sólo intervendrá el término N -ésimo, ya que el resto se anulan al realizar sus respectivas integraciones debido a las propiedades del conjunto de variables de Grassmann. Por tanto, desarrollando, paso a paso, llegamos a que I debe ser

$$\begin{aligned} I &= \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \sum_{n=0}^N (\eta^+ A \eta)^n = \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \frac{(-1)^N}{N!} (\eta^+ A \eta)^N \\ I &= \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \frac{1}{N!} \prod_{(i)(k)} \sum_{(i)(k)} \eta_i^* \eta_k A_{(i)(k)} = \\ &= \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \frac{1}{N!} \sum \sum \eta_{i_1}^* \eta_{k_1} \dots \eta_{i_N}^* \eta_{k_N} A_{i_1 k_1} \dots A_{i_N k_N} \end{aligned}$$

donde (i) , (k) denotan dos conjuntos de índices dados

$$(i) = (i_1, i_2, \dots, i_N)$$

$$(k) = (k_1, k_2, \dots, k_N)$$

Utilizando las propiedades de las variables de Grassman, podemos efectuar la suma en i , por ejemplo, ya que al permutar dos variables, obtenemos el mismo resultado, teniendo $N!$ contribuciones idénticas,

$$I = \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \sum_{(k)} \eta_1^* \eta_{k_1} \dots \eta_N^* \eta_{k_N} A_{1k_1} \dots A_{Nk_N}$$

e integrando la anterior en el conjunto de variables Grassmann y aplicando la definición de determinante, obtenemos finalmente la integral I

$$I = \frac{1}{(2\pi)^N} \sum_{(k)} (-1)^k A_{1k_1} \dots A_{Nk_N} = \frac{\det A}{(2\pi)^N}$$

Apéndice 2. Integral de $\det(\mathbb{F})$

Supongamos ahora que la matriz A_{jk} $n \times n$ no degenerada es ahora nuestra matriz \mathbb{F} definida mediante polinomios ortogonales. Recordando que:

$$\mathbb{F}_{jk} = \sum_{i=1}^N w(x_i) f_{i-1}(x_j) f_{i-1}(x_k)$$

Del apéndice 1, tenemos que

$$\det(\mathbb{F}) = (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) e^{-\eta^+ \mathbb{F} \eta}$$

Con la definición de \mathbb{F} y desarrollando la exponencial, llegamos a la expresión

$$\det(\mathbb{F}) = (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \prod_{l=1}^N \left[\sum_{m=0}^N \frac{(-1)^m}{m!} \left(\sum_{j,k} \eta_j^* \eta_k w(x_l) f_{l-1}(x_j) f_{l-1}(x_k) \right)^m \right]$$

En el desarrollo en serie de potencias anterior, podemos sacar factor común el término cuadrático, el cual se demuestra que es nulo, por la contracción del tensor antisimétrico $\Lambda^{jkqp} = \eta_j^* \eta_k \eta_q^* \eta_p$ con el simétrico $Q_{jkqp} = f_{l-1}(x_j) f_{l-1}(x_k) f_{l-1}(x_q) f_{l-1}(x_p)$. Jugando con los índices mudos y aplicando condiciones de simetría

$$\Lambda^{jkqp} Q_{jkqp} = -\Lambda^{jkqp} Q_{jkqp} = 0$$

Por tanto, en el desarrollo de la exponencial, nos quedamos con el término lineal, ya que todos los demás serán nulos. De todo esto, podemos concluir que

$$\det \mathbb{F} = (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \prod_{l=1}^N \left[1 - \sum_{j,k} \eta_j^* \eta_k w(x_l) f_{l-1}(x_j) f_{l-1}(x_k) \right]$$

e integrando, obtenemos la expresión final del determinante que es

$$\det \mathbb{F} = (2\pi)^N \int \left(\prod_{i=1}^N d\eta_i^* d\eta_i \right) \prod_{l=1}^N \left[- \sum_{j,k} \eta_j^* \eta_k w(x_l) f_{l-1}(x_j) f_{l-1}(x_k) \right]$$