

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

Formalismo de Koopman para sistemas híbridos

Autor:

Paul Rosa Ruiz

Directores:

Dr. Jesús Clemente Gallardo

D. David Martínez Crespo

Departamento de Física Teórica

Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza

Junio de 2023

Resumen

En este trabajo se generaliza el formalismo de Koopman para sistemas estadísticos clásicos empleando C^* -álgebras y la construcción GNS. Consideramos la aplicación a sistemas híbridos clásico-cuánticos y se comprueba que la dinámica unitaria híbrida tiene limitaciones para describir dinámica de sistemas físicos. Se propone una dinámica no unitaria nueva bien definida y se verifica que posee propiedades físicas más interesantes que la dinámica unitaria, a pesar de tener también ciertas limitaciones. Finalmente, se simula numéricamente un sistema híbrido sencillo para corroborar las predicciones teóricas de este trabajo.

Palabras clave: *Formalismo de Koopman, sistemas Hamiltonianos, sistemas híbridos, dinámica Markoviana.*

Abstract

In this project, we generalize Koopman's formalism for classical statistical mechanics, using C^* -algebras and the GNS construction and apply it to classical-quantum hybrid systems. We study the hybrid unitary dynamical systems and realize these have an important limitation when it comes to describing physical hybrid systems. In order to solve this limitations, we propose a non-unitary dynamical system based on the theory of quantum open systems, and we check that it is capable of describing more cases of real hybrid system's dynamics. Finally, we simulate numerically a simple hybrid system in order to sustain the theoretical predictions made in this project.

Palabras clave: *Koopman's formalims, Hamiltonian systems, hybrid systems, Markovian dynamics.*

Agradecimientos

En primer lugar, me gustaría agradecer este trabajo a mis directores, Jesús Clemente y David Martínez por su gran dedicación, por su apoyo en todo momento y por todo lo que me han enseñado. He disfrutado mucho trabajando con ellos.

En segundo lugar, me gustaría agradecer a todos mis amigos y compañeros de grado por los buenos momentos que hemos pasado; en especial, a José que hemos sido uña y carne en todo este camino.

Finalmente, quiero agradecer a mis padres por ser mi apoyo incondicional en cada paso que doy en el camino de la vida.

Índice general

1. Introducción y objetivos	1
2. Formalismo de Koopman y sistemas híbridos	4
2.1. Formalismo de Koopman para sistemas estadísticos clásicos I: Imagen de Schrödinger	4
2.2. Formalismo de Koopman para sistemas estadísticos clásicos II: Imagen de Heisenberg	7
2.3. C*-álgebra de sistemas híbridos	8
3. Dinámica híbrida	10
3.1. Dinámica híbrida unitaria	11
3.2. Dinámica híbrida Lindbladiana	12
3.2.1. Dinámica Markoviana en sistemas abiertos	12
3.2.2. Dinámica Lindbladiana en sistemas híbridos	14
4. Implementación numérica y ejemplos	16
4.1. Implementación numérica	16
4.2. Ejemplos	17
4.2.1. <i>Back-reaction</i>	18
4.2.2. Diferencias entre dinámicas	18
4.2.3. Términos de interacción	20
4.2.4. Operador de Kraus puramente cuántico	20
4.2.5. Resumen	21
5. Conclusiones y líneas de trabajo futuro	22
A. Preámbulo matemático	25
A.1. Álgebra	25
A.1.1. Teorema de Gleason	29
A.1.2. Teorema de Stone	30
B. Mecánica simpléctica	31
C. Formalismo de Koopman	36

D. La C^*-álgebra híbrida	38
D.1. Caso clásico	38
D.2. Caso cuántico	39
D.3. C^* -álgebra híbrida	40
E. Resultados auxiliares	42
E.1. Definición E.1.1	42
E.2. Teorema 3.2.1	42
F. Implementación numérica	45
F.1. Test	45
F.2. Simulación numérica	46
F.2.1. Koopman en este ejemplo	46
F.2.2. Simulación	46

Introducción y objetivos

Los sistemas híbridos clásico-cuánticos (SHCQ) son aproximaciones a aquellos sistemas originalmente cuánticos que contienen grados de libertad que pueden aproximarse como variables clásicas. Esta casuística puede darse cuando en un sistema hay diferentes escalas de energía o masa como ocurre, por ejemplo, en sistemas moleculares y de materia condensada donde el núcleo es pesado y lento y los electrones son ligeros y rápidos. De hecho, en física molecular, como son los electrones de valencia los que dotan a la molécula de sus propiedades químicas, en simulaciones numéricas estos electrones suelen tratarse cuánticamente y el núcleo y el resto de los electrones clásicamente para que el coste computacional de las simulaciones sea viable.

La mecánica clásica (MC) y la mecánica cuántica (MQ) presentan diferencias formales en cuanto a su estructura matemática subyacente se refiere: mientras que MC se ha descrito tradicionalmente en términos de geometría diferencial, la MQ ha recurrido al análisis funcional y al álgebra; sin embargo, para poder hacer un formalismo híbrido clásico-cuánticos, ambas teorías han de estar escritas en el mismo formalismo matemático. Una forma de tratar estos sistemas es con el formalismo de Ehrenfest, el cual permite controlar fácilmente el error que se comete en el modelo híbrido respecto al sistema puramente cuántico original (véase [4]). Las ecuaciones de Ehrenfest describen un sistema dinámico definido en el espacio de fases resultante de hacer el producto cartesiano de los espacios de fase clásico y la cuántico $M_C \times M_Q$. Las ecuaciones de Ehrenfest forman un sistema de ecuaciones no lineales acopladas que describen la dinámica del sistema híbrido, en la cual la parte clásica y la parte cuántica se ven afectadas mutuamente. En [3] se prueba que este sistema admite una estructura Hamiltoniana con un determinado corchete de Poisson híbrido y una función Hamiltoniana híbrida, haciendo posible el tratamiento geométrico de estos sistemas.

Hasta aquí, hemos considerado sistemas puros, sin embargo, en simulaciones moleculares por ejemplo, es prácticamente imposible determinar el estado inicial de la molécula, por lo que, es más razonable tratar con sistemas estadísticos en vez de sistemas puros. Ya que se tratan de sistemas Hamiltonianos, una posibilidad consiste en tratarlos en términos geométricos, es decir, un sistema estadístico híbrido quedaría descrito en términos de densidades de probabilidad sobre el espacio de

fases híbrido M_{CQ} . Así, dada una densidad de probabilidad $F : M_{CQ} \rightarrow \mathbb{R}$ los valores esperados de las magnitudes físicas se escriben como:

$$\langle A \rangle = \int_{M_{CQ}} d\mu_{CQ} F A,$$

donde $A \in C^\infty(M_{CQ})$ (véase [3]), y su dinámica viene dada por la Ecuación de Liouville:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\{F, H\} \quad (1.0.1)$$

donde $H \in C^\infty(M_{CQ})$ es el Hamiltoniano híbrido.

Además, la construcción de una mecánica estadística de equilibrio para sistemas híbridos es fundamental para muchas otras aplicaciones, por ejemplo, en simulaciones moleculares a una temperatura finita resulta crucial conocer el *ensemble* canónico del sistema y su entropía asociada. Sin embargo, antes de definir una mecánica estadística para sistemas híbridos en equilibrio, debemos considerar tres cuestiones importantes:

- ¿Cómo se define una entropía en sistemas híbridos?
- ¿Cuál es la dinámica de estos sistemas?
- ¿Esta dinámica deja invariante el *ensemble* canónico? O dicho de otra manera, ¿puede usarse el formalismo de Máxima Entropía (MaxEnt) para obtener el *ensemble* canónico de sistemas híbridos?

Desafortunadamente, el tratamiento geométrico de SHCQ descrito arriba tiene una limitación muy importante: la imposibilidad de calcular la entropía del sistema estadístico. Recordemos que la definición de una entropía requiere la distinción de eventos mutuamente excluyentes, sin embargo, no hay ninguna manera de determinar si dos eventos son mutuamente excluyentes empleando este tratamiento geométrico (véase [2]). La única manera de solventar esta limitación es recurrir al formalismo de las matrices de densidad ρ y emplear la entropía de von Neumann $S = -\text{tr}(\rho \ln \rho)$. De hecho, en [1] se define una entropía para sistemas híbridos y se propone una candidata para el *ensemble* canónico empleando matrices de densidad híbridas. Sin embargo, a día de hoy, debido a la no linealidad de la dinámica híbrida, no se conoce cómo evolucionan con el tiempo en este formalismo (ver [8]). Como resumen, podemos concluir que el tratamiento geométrico de SHCQ no presenta ningún formalismo matemático que permita describir una dinámica híbrida consistente y permita, a su vez, considerar la entropía necesaria para una mecánica estadística híbrida de equilibrio. Nuestro trabajo va a abordar este problema.

En 1931 [10], Bernard Koopman demuestra que la mecánica estadística clásica puede tratarse con las mismas técnicas matemáticas que la MQ. Bajo el formalismo de Koopman, los estados de mecánica estadística clásica vienen dados por elementos de un espacio de Hilbert y las magnitudes físicas

se describen mediante operadores definidos en dicho espacio. Además, se tiene una ecuación de tipo Schrödinger en este espacio desde la cual se puede recuperar la dinámica clásica dada por la ecuación de Liouville. Nótese que esta dinámica cuántica es lineal, frente a la no lineal de la que partimos, es decir, la construcción de Koopman linealiza la dinámica. Naturalmente, dicho enfoque abre las puertas a una nueva forma de tratar los SHCQ en términos de espacios de Hilbert y de operadores, en particular, la definición de una entropía del sistema en este formalismo es inmediata. En [6] se estudia la forma de adaptar el formalismo de Koopman a sistemas híbridos y se propone una dinámica unitaria, la cual es la dinámica más sencilla a estudiar en este contexto. No obstante, en ese artículo se demuestra que los grados de libertad cuánticos reciben influencia de los clásicos pero no en el otro sentido, es decir, que la dinámica híbrida unitaria no presenta *back-reaction*; lo cual supone una limitación a la hora de describir ciertos sistemas físicos.

Este trabajo nace de la necesidad de encontrar una dinámica híbrida no unitaria con propiedades físicas más interesantes que la unitaria, como puede ser la *back-reaction*, en el formalismo de Koopman. De hecho, veremos que la dinámica no unitaria más simple (dinámica Lindbladiana) sí que presenta *back-reaction*; lo demostraremos analíticamente y lo veremos mediante simulaciones numéricas de un ejemplo sencillo.

La estructura del documento es la siguiente. En el capítulo 2 se parte de la construcción original de Koopman para sistemas puramente clásicos y se adapta a sistemas híbridos. Para ello, se presenta una estructura matemática que permite el tratamiento de sistemas clásicos en la imagen de Heisenberg de forma más general. En el capítulo 3 nos centraremos en la dinámica de sistemas híbridos y veremos dos dinámicas híbridas distintas, una unitaria y otra no unitaria. Por un lado, se hace una exposición de la unitaria y se presentan las propiedades físicas que tiene (véase [6]). Por otro lado, se propone la dinámica no unitaria más simple disponible en la literatura (la dinámica Lindbladiana) y se estudia sus propiedades. En el capítulo 4 haremos una implementación numérica del formalismo de Koopman para sistemas híbridos e ilustraremos y corroboraremos los resultados obtenidos en el capítulo anterior con un ejemplo.

El uso de una dinámica Lindbladiana en sistemas híbridos supone la mayor aportación original de este trabajo, siendo el primer capítulo y la primera parte del segundo una revisión bibliográfica que pretende incidir sobre aquellos aspectos que permiten fundamentar y proporcionar una mejor comprensión de los resultados finales.

Este trabajo partió de una buena comprensión del problema al cual este trabajo busca dar solución. A esto le siguió un estudio exhaustivo de herramientas de análisis funcional, álgebra, geometría diferencial y de mecánica hamiltoniana, con la ayuda de libros de texto y bibliografía especializada. El siguiente paso consistió en idear una posible solución al problema planteado y en estudiar analíticamente bajo qué condiciones esta solución es válida y sus consecuencias físicas. Finalmente, se usaron herramientas del cálculo numérico para simular un ejemplo concreto en diferentes casos para su posterior análisis. El código desarrollado puede encontrarse en [GitHub](#).

Formalismo de Koopman y sistemas híbridos

En este capítulo, en primer lugar, resumimos el formalismo de Koopman para sistemas estadísticos clásicos y, en segundo lugar, lo generalizaremos para obtener una dinámica para sistemas híbridos. Para ello, construiremos una C^* -álgebra que represente los sistemas híbridos, a continuación, describiremos estados del sistema híbrido como matrices densidad en el espacio de Hilbert obtenidos a partir de la construcción GNS y definiremos sistemas dinámicos clásico-cuánticos como automorfismos (externos) de la C^* -álgebra híbrida. Finalmente, caracterizaremos las dinámicas unitarias para sistemas híbridos

2.1. Formalismo de Koopman para sistemas estadísticos clásicos I: Imagen de Schrödinger

En esta sección, se hace una presentación resumida de la forma en la que Koopman describió un sistema estadístico clásico mediante un espacio de Hilbert en su artículo original [10] de 1931. Para una exposición más detallada y rigurosa, véase el Apéndice C.

Consideramos un sistema estadístico Hamiltoniano clásico definido sobre un espacio de fases \mathcal{M} de dimensión $2n$ con las correspondientes coordenadas generalizadas q^i y momentos conjugados p_i , para $i = 1, \dots, n$ (coordenadas de la carta de Darboux sobre \mathcal{M}). La densidad de probabilidad $\rho : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}^+$ integrada sobre una región del espacio de fases da la probabilidad de que el sistema se encuentre en dicha región, y cumple:

$$\int_{\mathcal{M}} \rho \cdot dq^1 \wedge \dots \wedge dq^n \wedge dp_1 \wedge \dots \wedge dp_n = 1.$$

Dado un Hamiltoniano $H \in C^\infty(\mathcal{M})$, la dinámica de la densidad de probabilidad viene dada por la ecuación de Liouville:

$$\dot{\rho} = -\{\rho, H\}, \tag{2.1.1}$$

donde $\{\cdot\}$ es el corchete de Poisson (ver Definición B.0.7).

El formalismo de Koopman permite describir un sistema estadístico clásico mediante un espacio de Hilbert. La densidad de probabilidad es obtenida a partir del módulo al cuadrado¹ de una función de onda subyacente, los observables vendrán descritos como operadores multiplicativos² y autoadjuntos, y la dinámica se describe a partir de la correspondiente ecuación de Schrödinger. En su artículo de 1931 ([10]), Koopman demostró que la dinámica que se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinger equivale a la obtenida mediante la ecuación de Liouville clásica. Véase la Tabla comparativa 2.1.1 entre ambos marcos teóricos.

	Sistema estadístico clásico	Formalismo Koopman
Estado	Densidad de probabilidad sobre el espacio de fases	Función de onda
Observables	Funciones C^∞ sobre el espacio de fases	Operadores conmutativos y autoadjuntos
Dinámica	Ecuación de Liouville (no lineal)	Ecuación de Schrödinger (lineal)

Cuadro 2.1.1

A continuación, se presenta la forma que empleó Koopman originalmente para describir mecánica estadística clásica en términos de espacios de Hilbert. Para ello, definimos el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathcal{M})$ de funciones de cuadrado integrable sobre \mathcal{M} como:

$$\mathcal{L}^2(\mathcal{M}) = \left\{ f : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{\mathcal{M}} \bar{f} f \, dq^n dp^n < \infty \right\}, \quad (2.1.2)$$

junto con su producto escalar

$$\langle f | g \rangle := \int_{\mathcal{M}} \bar{f} g \, dq^n dp^n \quad \forall f, g \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}). \quad (2.1.3)$$

Consideremos un³ estado $\phi_\rho \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M})$ que cumple:

$$\rho = \bar{\phi}_\rho \phi_\rho, \quad (2.1.4)$$

entonces, ϕ_ρ representa el estado de nuestro sistema estadístico clásico en términos del espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathcal{M})$.

En este formalismo, los observables clásicos corresponden a espectros, en general continuos, de operadores en el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathcal{M})$. En particular, como las variables q 's y p 's son análogas, los que tradicionalmente en física se consideran operadores posición \hat{Q} y momento \hat{P} , cuyos espectros corresponden a las q 's y p 's, deben conmutar. Por tanto, por extensión, se tiene que el álgebra de

¹Analogía a la regla de Born de la Mecánica Cuántica.

²A diferencia de en la Mecánica Cuántica, la conmutatividad de los operadores implica la posibilidad de la medida simultánea de dos observables clásicos cualesquiera

³No es único debido a la fase.

observables clásicos es conmutativa vista como operadores del espacio de Hilbert. En la imagen de Heisenberg, donde la dinámica está definida sobre los operadores, esta conmutatividad impide definir una evolución que corresponda a un automorfismo interior el álgebra como ocurre en la ecuación de Heisenberg habitual que corresponde a la acción del conmutador con un Hamiltoniano contenido en el álgebra. Por tanto, para poder definir una dinámica no trivial a partir de la acción adjunta de un operador Hamiltoniano, se requiere extender el álgebra de observables clásicos y definir un automorfismo externo que deje invariante la subálgebra conmutativa clásica. Es esto lo se ha hecho en el formalismo de Koopman al definir el operador de Koopman que es un operador diferencial de primer orden por lo que no define un automorfismo interno de la subálgebra conmutativa de las magnitudes físicas⁴. Que el operador de Koopman no pertenezca al álgebra de magnitudes físicas va a tener grandes implicaciones a lo largo del trabajo.

Llegados a este punto, nos hacemos la pregunta ¿cómo evoluciona el estado ϕ_ρ a lo largo del tiempo? Para responderla, consideramos el flujo Hamiltoniano clásico $F_t : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$, que es una transformación canónica⁵ sobre \mathcal{M} . En [10], Koopman probó que este flujo define una transformación unitaria en el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathcal{M})$ y, por el Teorema de Stone (Teorema A.1.8), existe un operador autoadjunto \hat{L} tal que es el generador infinitesimal de la evolución temporal.

Definición 2.1.1 (Operador de Koopman). Se define el *operador de Koopman* como el operador diferencial de primer orden dado por:

$$\hat{L} = -i \left(\frac{\partial H}{\partial q^k} \frac{\partial}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial}{\partial q^k} \right). \quad (2.1.5)$$

Este operador de Koopman corresponde al generador infinitesimal del operador unitario correspondiente al flujo Hamiltoniano. De esta manera, se tiene una ecuación de Schrödinger en $\mathcal{L}^2(\mathcal{M})$ para ϕ_ρ desde la cual se recupera la ecuación de Liouville si se calcula ρ con la Ecuación (2.1.4):

$$i\dot{\phi}_\rho = \hat{L}\phi_\rho, \quad (2.1.6)$$

donde recordemos que $\phi_\rho = \phi_\rho(q^i, p_j)$ depende de las coordenadas generalizadas q^i y de los momentos conjugados p_j . Es decir, \hat{L} hace las veces de Hamiltoniano para una ecuación de Schrödinger.

Como conclusión, el formalismo de Koopman define un álgebra conmutativa de operadores que representan magnitudes clásicas que es una subálgebra del espacio de operadores lineales del espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(M)$. La dinámica viene dada por un automorfismo exterior del subálgebra generada por el operador de Koopman

⁴Ya que, los operadores $\frac{\partial}{\partial q^k}$ y $\frac{\partial}{\partial p_k}$ no son observables físicos.

⁵Una transformación canónica es aquella que deja invariante el paréntesis de Poisson o, en otras palabras, conserva la forma y la validez de las ecuaciones de Hamilton.

2.2. Formalismo de Koopman para sistemas estadísticos clásicos II: Imagen de Heisenberg

La forma moderna de tratar el formalismo de Heisenberg de un sistema físico es mediante una estructura matemática llamada C^* -álgebra. Esta estructura alberga toda la información física sobre el conjunto de observables de un sistema como puede ser la dinámica y las probabilidades de un sistema estadístico⁶, por tanto, lo podemos usar para generalizar el formalismo de Koopman a cualquier sistema físico descrito por una C^* -álgebra. Para ello, en esta sección, escribiremos el formalismo de Koopman que hemos visto en la Sección anterior (véase Sección 2.1) en términos de C^* -álgebras, para, a posteriori, facilitar la generalización de este procedimiento a la C^* -álgebra de un sistema híbrido.

Una C^* -álgebra es una estructura algebraica compleja que tiene definida una norma y una conjugación en la que podremos identificar una parte real (la subálgebra autoadjunta) y una parte imaginaria (véase Definición A.1.13). Esta subálgebra autoadjunta de un sistema corresponderá a los observables físicos del mismo. La construcción GNS⁷ (véase Apéndice A.1) nos asegura que dada una C^* -álgebra \mathcal{A} cualquiera⁸, se puede construir una representación π de \mathcal{A} en el conjunto de operadores lineales y acotados de un espacio de Hilbert $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, es decir, una C^* -álgebra puede representarse como un subconjunto de operadores lineales y acotados de un espacio de Hilbert⁹; esto justifica que nos basta conocer el álgebra \mathcal{A} para reconstruir el conjunto de operadores y estados de un modelo. Las matrices de densidad de dicho espacio de Hilbert serán duales a esos operadores y corresponderán a los estados físicos del sistema. Si dotamos de dinámica a los operadores de dicho espacio de Hilbert, diremos que estamos en la imagen de Heisenberg, si por el contrario, dotamos de dinámica a las matrices de densidad, diremos que estamos en la imagen de Schrödinger.

Hagamos lo mismo que hizo Koopman originalmente pero en términos de C^* -álgebras. Para empezar, Koopman toma la C^* -álgebra clásica \mathcal{A}_C correspondiente a la complexificación de los observables clásicos $C_c(\mathcal{M}_C)$ (\mathcal{M}_C el espacio de fases) y, mediante un procedimiento idéntico a la construcción GNS, obtiene una representación del álgebra \mathcal{A}_C dentro de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$, el conjunto de operadores acotados del espacio de Hilbert $\mathcal{H}_C = \mathcal{L}^2(\mathcal{M})$, donde los estados físicos serán elementos de su dual $\mathcal{B}^*(\mathcal{H}_C)$ que se pueden representar por matrices densidad (véase Figura 2.2.1b).

Sin embargo, el operador de Koopman (cuya representación será el operador Hamiltoniano) no pertenece a la C^* -álgebra \mathcal{A}_C , ya que, Π_{q^k} y Π_{p_k} no son elementos de \mathcal{A}_C , es decir, el operador de Koopman no es un observable físico porque Π_{q^k} y Π_{p_k} tampoco lo son. De hecho, necesitamos que el operador de Koopman no esté en \mathcal{A}_C para definir una dinámica no trivial en mecánica clásica

⁶Más precisamente, es la subálgebra autoadjunta, que forma un álgebra de Lie-Jordan-Banach la que alberga las propiedades físicas del sistema.

⁷El procedimiento de Koopman resulta un caso particular de este procedimiento; aunque cabe destacar, que históricamente, la construcción GNS es posterior al artículo original de Koopman.

⁸Y un estado (en el sentido de C^* -álgebra) $\omega \in \mathcal{A}$ de \mathcal{A}

⁹En el caso de Koopman, este espacio de Hilbert es $\mathcal{L}^2(\mathcal{M})$

en este formalismo. Los operadores \hat{Q} y \hat{P} , correspondientes a los elementos de \mathcal{A}_C q y p ; y los operadores $\pi_C(\Pi_q)$ y $\pi_C(\Pi_p)$, correspondientes a los elementos derivativos Π_{q^k} y Π_{p^k} ; actúan sobre un $\phi(q, p) \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M})$ de la siguiente manera:

- $\hat{Q}\phi(q, p) = q \cdot \phi(q, p)$, $\hat{P}\phi(q, p) = p \cdot \phi(q, p)$,
- $\pi_C(\Pi_q)\phi(q, p) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}\phi(q, p)$, $\pi_C(\Pi_p)\phi(q, p) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\phi(q, p)$.

En cuanto a la dinámica, hemos visto que, en el formalismo de Koopman, la ecuación de Liouville de un sistema estadístico clásico en un espacio de fases puede resolverse como la acción de un grupo uniparamétrico de transformaciones unitarias en un espacio de Hilbert, es decir, que tenía una ecuación de Schrödinger asociada. Este procedimiento linealiza cualquier dinámica clásica no lineal, en otras palabras, al describir la dinámica clásica en términos de un espacio de Hilbert, esta se vuelve lineal (véase la Ecuación (2.1.6) donde el operador de Koopman es un operador lineal). Además, a pesar de que la dinámica ha de estar definida en todo $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$, esta ha de dejar invariante la representación de la subálgebra conmutativa $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ y el de los estados físicos (matrices densidad) $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C) \subset \mathcal{B}^*(\mathcal{H}_C)$ (en la Figura 2.2.1b se pretende ilustrar esta invariancia de la dinámica respecto a los subálgebras clásicos) para que esté bien definido físicamente. En resumen, la dinámica de Koopman en la imagen de Heisenberg corresponde a un automorfismo externo del subálgebra $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ generado por un operador Hamiltoniano (2.1.5) que está fuera de la misma.

Si queremos escribir la dinámica sobre los estados, podemos escribir la ecuación de von Neumann asociada.

$$i\dot{\rho} = [\hat{L}, \rho] \quad (2.2.1)$$

Basados en las propiedades de la dinámica cuántica del formalismo de Koopman para sistemas clásicos, impondremos que cualquier dinámica en sistemas híbridos deba cumplir las mismas propiedades.

2.3. C^* -álgebra de sistemas híbridos

Una vez visto cómo es el procedimiento, en términos de C^* -álgebras, que empleó Koopman originalmente para describir un sistema estadístico clásico en términos de operadores sobre un espacio de Hilbert, identificaremos la C^* -álgebra clásica (la misma que empleó Koopman, véase Sección 2.2) y la cuántica y postularemos la C^* -álgebra híbrida resultante de unir las dos. Una presentación más detallada y rigurosa de lo que se va a hacer a continuación se puede encontrar en el Apéndice D.

Por un lado, la C^* -álgebra de un sistema cuántico \mathcal{A}_Q será el álgebra de operadores acotados $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} y los observables, naturalmente, los operadores autoadjuntos sobre dicho espacio, es decir, lo común en mecánica cuántica.

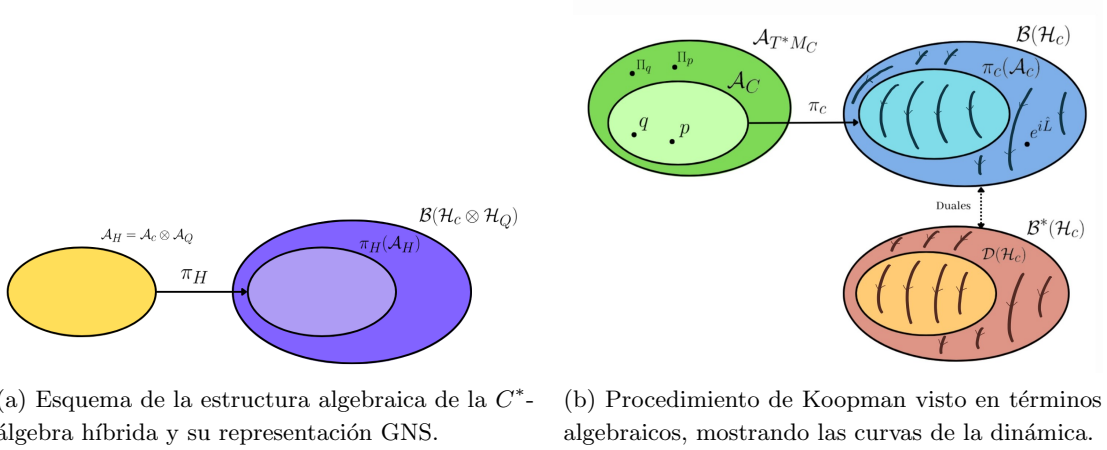


Figura 2.2.1: Esquemas de las estructuras algebraicas.

Por otro lado, la C^* -álgebra de un sistema clásico \mathcal{A}_C , como se ha visto en la sección anterior, será la complexificación del conjunto de funciones continuas de soporte compacto sobre el espacio de fases $C_c(\mathcal{M}, \mathbb{C})$. Al contrario de lo que pasa en el caso cuántico, en el caso clásico la parte imaginaria de la C^* -álgebra¹⁰ es un artificio matemático sin significado físico, ya que, son los observables los únicos elementos del álgebra clásica los que poseen sentido físico.

En [6], se postula que el sistema híbrido vendrá descrito por la C^* -álgebra resultante de hacer el producto tensorial de la C^* -álgebra clásica y cuántica $\mathcal{A}_H := \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$. En física cuántica, el espacio de Hilbert de un sistema compuesto de dos subsistemas es el producto tensorial entre sus espacios de Hilbert, por tanto, la razón de definir \mathcal{A}_H como el producto tensorial del sistema clásico y el cuántico es que el sistema original es puramente cuántico y lo estamos interpretando como la combinación de dos subsistemas cuánticos, a pesar de que los operadores de la parte clásica conmuten. Aunque puede haber más formas de definirla, en este trabajo se seguirá este postulado. Por ejemplo, si tenemos un sistema clásico acoplado a un sistema cuántico de dos niveles, los elementos de \mathcal{A}_H serán matrices 2×2 cuyos elementos dependerán de (q^i, p_i) :

$$\begin{pmatrix} f_1 & f_2 \\ f_3 & f_4 \end{pmatrix}, \quad \text{donde } f_k = f_k(q^i, p_i) \forall k.$$

En cuanto a los sistemas híbridos, a partir de la construcción anterior, tendremos una representación $\pi_H = \pi_C \otimes \pi_Q$ y los operadores de sistemas híbridos (cuyas C^* -álgebras tendrán la forma $\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$) formarán una subálgebra $\pi_H(\mathcal{A}_H) = \pi_C(\mathcal{A}_C) \otimes \pi_Q(\mathcal{A}_Q) \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$ del espacio de operadores lineales y acotados de un espacio de Hilbert $\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q$ (véase Figura 2.2.1a). Los estados del sistema híbrido vendrán dados por sus matrices densidad correspondientes (véase Teorema A.1.7) $\mathcal{D}(\mathcal{H}) \subset \mathcal{B}^*(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$.

¹⁰La parte imaginaria de la C^* -álgebra cuántica contiene, entre otros, el operador unitario que describe la dinámica de un sistema físico, ya que, esta no es autoadjunta. Es decir, la parte imaginaria de dicha álgebra cuántica surge naturalmente y posee sentido físico.

Dinámica híbrida

Sea un sistema híbrido descrito por la C^* -álgebra $\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$ y $\pi_H = \pi_C \otimes \pi_Q$ la representación GNS sobre $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$ (véase Sección 2.3). En analogía al formalismo de Koopman para sistemas clásicos (véase Ecuaciones 2.1.6 y 2.2.1 de la Sección 2.2), una dinámica híbrida deberá cumplir las siguientes condiciones:

1. La dinámica será lineal, por lo que existe un operador $\mathcal{L} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$ tal que

$$\frac{d\pi_H(f)(t)}{dt} = \mathcal{L}\pi_H(f)(t), \quad \forall f \in \mathcal{A}_H, \quad (3.0.1)$$

y en el espacio de matrices densidad $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$,

$$\frac{d\hat{\rho}_H(t)}{dt} = \mathcal{L}^\dagger \hat{\rho}_H(t), \quad \forall \hat{\rho}_H \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q), \quad (3.0.2)$$

2. La evolución ha de ser tangente al conjunto de matrices densidad $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$, es decir, ha de definir una curva en el espacio de operadores autoadjuntos definidos positivos ($e^{\mathcal{L}t} \mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q) \subset \mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$, $\forall t$) y la traza se ha de preservar:

$$\text{Tr} \hat{\rho}_H(t) = 1, \quad \forall t \Rightarrow \text{Tr} \left(\frac{d\hat{\rho}_H(t)}{dt} \right) = 0.$$

3. La evolución ha de ser un automorfismo externo¹ de $\pi_H(\mathcal{A}_H)$, es decir, necesitamos definir un operador Hamiltoniano que no pertenezca a la C^* -álgebra conmutativa clásica² y la evolución debe dejar invariante el subespacio $\pi_H(\mathcal{A}_H) \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$, i.e.

$$e^{\mathcal{L}t}(\pi_H(\mathcal{A}_H)) \subset \pi_H(\mathcal{A}_H), \quad \forall t.$$

¹La C^* -álgebra conmutativa clásica \mathcal{A}_C tiene una estructura de Lie trivial y, como la estructura de Lie está asociada a la evolución temporal del sistema, si esta se anula para todo elemento del álgebra, no habría dinámica.

²Análogo al formalismo de Koopman donde el operador de Koopman, que hacía las veces de Hamiltoniano, tampoco pertenecía a \mathcal{A}_C .

A continuación, se verán los dos casos de dinámicas más simples posibles, ya que, ambas cumplen, por construcción, la condición 1 y 2; es decir, ambas dinámicas son lineales y dejan el espacio de matrices de densidad invariantes. Comprobar que una dinámica cumple la condición 2 analíticamente es costoso y estos ejemplos son ideales ya que nos aseguran que esta condición se cumple, pudiendo, así, despreocuparnos de ello. En ambos casos, solamente debemos imponer la condición 3.

3.1. Dinámica híbrida unitaria

En esta sección, consideraremos **dinámica unitaria**, por lo que existirá un operador Hamiltoniano \hat{H} tal que el operador \mathcal{L} será su acción adjunta, i.e.

$$\frac{d\pi_H(f)(t)}{dt} = i[\hat{H}, \pi_H(f)(t)], \quad \forall f \in \mathcal{A}_H, \quad (3.1.1)$$

o su ecuación dual correspondiente a la ecuación de von Neumann para sistemas clásicos (empleando matrices de densidad):

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -i[\hat{H}, \rho(t)], \quad \forall \rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q),$$

donde $[\cdot, \cdot]$ es el conmutador. Esta ecuación dinámica para las matrices densidad define las órbitas de la acción coadjunta del operador evolución, es decir, la dinámica unitaria preserva el conjunto de matrices densidad $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$ (cumple la condición 2), como lo hace cualquier sistema cuántico.

A partir de ahora, sin pérdida de generalidad, descompondremos el Hamiltoniano como:

$$\hat{H} = \hat{H}_C \otimes \mathbb{I}_Q + \mathbb{I}_C \otimes \hat{H}_Q + \hat{H}_{CQ} \quad (3.1.2)$$

En [6] se da la forma que debe tomar el operador Hamiltoniano de una dinámica híbrida unitaria para que cumpla la condición 3, cuando tiene la forma de la Ecuación (3.1.2).

Teorema 3.1.1. *El único operador Hamiltoniano de la forma de la Ecuación (3.1.2) que genera una dinámica unitaria en $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$ que define un automorfismo externo del subálgebra híbrido $\pi_H(\mathcal{A}_H)$ tiene:*

- una dependencia lineal respecto a $\pi_C(\Pi_{q^k})$ y $\pi_C(\Pi_{p_j})$ en \hat{H}_C tal que

$$\hat{H}_C = \sum_{kj} (\alpha_k \pi_C(\Pi_{q^k}) + \beta_j \pi_C(\Pi_{p_j})), \quad (3.1.3)$$

donde $\alpha_k, \beta_j \in \mathbb{R}$ y $\hat{H}_C \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$.

- Las exponenciales de los otros coeficientes deben pertenecer a sus correspondientes subálgebras, i.e., $e^{\hat{H}_Q} \in \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$, $e^{\hat{H}_{CQ}} \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$.

Para recuperar la expresión de la construcción de Koopman, podemos darle los siguientes valores a los coeficientes α_k, β_j :

$$\alpha_k = \pi_C \left(\frac{\partial H_C(q, p)}{\partial p_k} \right), \quad \beta_j = -\pi_C \left(\frac{\partial H_C(q, p)}{\partial q^j} \right), \quad (3.1.4)$$

donde la función $H_C(q, p) \in \mathcal{A}_C$ representa la energía de los grados de libertad clásicos.

Esta dinámica presenta una limitación importante: la falta de *back-reaction*, un operador puramente clásico nunca deja de ser puramente clásico con el tiempo, es decir, los grados de libertad cuánticos no afectan a los clásicos. Veámoslo con el operador³ $\hat{Q} \otimes \mathbb{I}$. La evolución de dicho operador vendrá dada por la Ecuación (3.1.1):

$$i\hbar \frac{d}{dt}(\hat{Q} \otimes \mathbb{I}) = i[\hbar c, \hat{Q}] \otimes \hbar c + i[H_C, \hat{Q}] \otimes \mathbb{I}. \quad (3.1.5)$$

Vemos, efectivamente, que esta dinámica carece de esa *back-reaction* dado que la evolución de un observable clásico solo va a depender de la parte clásica, y hará falta buscar dinámicas más generales (no unitarias) que tengan propiedades como las de las Ecuaciones de Ehrenfest.

3.2. Dinámica híbrida Lindbladiana

En esta sección, se presenta la principal aportación original, que consiste en la propuesta de una dinámica híbrida no unitaria inspirada en la evolución Markoviana en sistemas abiertos. Para ello, primero, presentaremos la ecuación de Kossakowski-Lindblad y, a continuación, la adaptaremos a sistemas híbridos imponiendo que la dinámica sea un automorfismo externo de $\pi_H(\mathcal{A}_H)$.

3.2.1. Dinámica Markoviana en sistemas abiertos

Un sistema se denomina abierto si no está aislado, es decir, si interactúa con el entorno. La dinámica cuántica de estos sistemas, al contrario de sistemas cerrados, en general, no puede representarse en términos de una evolución temporal unitaria, sino que debe escribirse mediante una ecuación del movimiento para las matrices densidad⁴. La dinámica no unitaria más sencilla será la Markoviana que dependerá de unos operadores de Kraus que determinan la interacción entre el sistema y el entorno. Una de las dificultades de la descripción de estos sistemas proviene de las correlaciones entre el sistema y el entorno, sin embargo, considerando el entorno como un baño térmico, un reservorio o un equipo de medición, se considera aceptable despreciar el efecto que produce el sistema cuántico sobre el entorno, lo que implica que la transformación dinámica del sistema cuántico será **completamente positivo** (véase Definición E.1.1).

Una evolución Markoviana tiene como propiedad más relevante que el estado en un tiempo dado no depende del estado en un tiempo anterior, o como se suele decir coloquialmente, una evolución "que no tiene memoria". Matemáticamente hablando, el conjunto de transformaciones dinámicas Markovianas forman un **semigrupo**⁵.

³Dado que \hat{Q} y \hat{P} son equivalentes y la ecuación diferencial de la dinámica es lineal, si no hay *back-reaction* para $\hat{Q} \otimes \mathbb{I}$ no la hay para ninguna función bilineal $f(\hat{Q}, \hat{P})$,

⁴Una ecuación maestra cuántica.

⁵No forma un grupo porque, para cualquier evolución, no existe su transformación dinámica inversa correspondiente, ya que, si existiera, el sistema tendría memoria.

Definición 3.2.1 (Evolución Markoviana). La evolución de un sistema abierto cuántico se dice que es Markoviana si la transformación dinámica $\epsilon_{t',t} : \mathcal{D}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{D}(\mathcal{H})$ para todo $t' \geq t$ satisface la condición

$$\epsilon_{t_2,t_1} \circ \epsilon_{t_1,t_0} = \epsilon_{t_2,t_0}, \quad \forall t_2 \geq t_1 \geq t_0. \quad (3.2.1)$$

En el contexto de sistemas abiertos, la memoria de estados anteriores a un tiempo determinado se encuentra en el entorno, pero como se considera que el entorno es un reservorio, este no se ve afectado por el sistema y se da una evolución sin memoria, es decir, un sistema abierto tiene una evolución Markoviana.

Como resumen, el hecho de despreciar las correlaciones entre el sistema y el entorno implica que la dinámica de un sistema abierto vendrá dada por el semigrupo de transformaciones lineales completamente positivos. A continuación introducimos la ecuación maestra que rige la evolución de las matrices densidad del sistema cuántico:

Definición 3.2.2 (Ecuación de Kossakowski-Lindblad ([11] 1972, [12] 1976)). Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert N -dimensional describiendo un sistema cuántico, y $\mathcal{D}(\mathcal{H}) \subset \mathcal{B}^*(\mathcal{H})$ el conjunto de estados puros y estados mezcla. Asumiendo que la evolución del sistema viene dada por un semigrupo de transformaciones lineales completamente positivas $\{\phi_t^L : \mathcal{D}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{D}(\mathcal{H}), t \geq 0\}$. Estas transformaciones satisfacen la ecuación diferencial:

$$\frac{d}{dt}\phi_t^L(\rho_0) = L(\phi_t^L(\rho_0)). \quad (3.2.2)$$

La transformación lineal $L : \text{Herm}(\mathcal{H}) \rightarrow \text{Herm}(\mathcal{H})$ se llama el operador de Kossakowski-Lindblad, y está dado por:

$$L(\rho) = \underbrace{-i[H, \rho]}_{\text{dinámica unitaria}} + \underbrace{\sum_{j=1}^{N^2-1} \gamma_j \left(V_j \rho V_j^\dagger - \frac{1}{2} V_j^\dagger V_j \rho - \frac{1}{2} \rho V_j^\dagger V_j \right)}_{\text{dinámica Lindbladiana}}, \quad (3.2.3)$$

$\mathcal{D}(\rho) : \text{disipador}$

con $\rho \in \mathcal{S}$, $H^\dagger = H$, $\text{tr}(H) = 0$ ⁶, $\text{tr}(V_j) = 0$ y $\text{tr}(V_j^\dagger V_k) = 0$ si $j \neq k$, para $j, k = 1, 2, \dots, N^2 - 1$.

Una forma más común de escribir la Ecuación 3.2.2, que corresponde a la imagen de Schrödinger, es la siguiente:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = L(\rho(t)) \quad \forall t, \forall \rho(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q), \quad (3.2.4)$$

o en términos de operadores, en la imagen de Heisenberg,

$$\frac{d}{dt}A_H(t) = L^\dagger(A_H(t)) = i[H, A_H(t)] + \sum_{j=1}^{N^2-1} \gamma_j \left(V_j^\dagger A_H(t) V_j - \frac{1}{2} V_j^\dagger V_j A_H(t) - \frac{1}{2} A_H(t) V_j^\dagger V_j \right), \quad (3.2.5)$$

$\forall t, \forall A_H \in \pi_H(\mathcal{A}_H).$

⁶Dada una evolución, H está unívocamente determinado por la condición de la traza.

Los operadores V_j , $j = 1, \dots, N^2 - 1$ se denominan los **operadores de Kraus** y se encargan de determinar la interacción entre el sistema y el entorno. Para una descripción detallada de la obtención de la ecuación maestra véase [9]. La ecuación de Kossakowski-Lindblad describe la evolución no unitaria más sencilla, es por esto que se ha elegido como candidata para emplearlo en sistemas híbridos más adelante como primera aproximación de una dinámica híbrida no unitaria.

3.2.2. Dinámica Lindbladiana en sistemas híbridos

En esta sección, adaptaremos la dinámica Lindbladiana de sistemas abiertos a sistemas híbridos imponiendo a la ecuación de Kossakowski-Lindblad (3.2.5) las condiciones que debe cumplir cualquier dinámica híbrida. Como se ha mencionado anteriormente, por construcción, la dinámica Lindbladiana deja invariante el conjunto de matrices de densidad; además, la dinámica es lineal (véase la linealidad del operador de Kossakowski-Lindblad en la Ecuación 3.2.3). Por tanto, la única condición que se ha de imponer a mano será la condición de que la evolución debe dejar invariante el subálgebra $\pi_H(\mathcal{A}_H)$.

Para ello, es suficiente imponer que transformación infinitesimal de cada operador de $\pi_H(\mathcal{A}_H)$ sea un operador del mismo espacio. Esta condición implica que la parte clásica de $\frac{d}{dt}A_H(t) = \frac{d}{dt}(A_C(t) \otimes A_Q(t))$ solo debe depender de los operadores⁷ (\hat{Q}^i, \hat{P}_j) y no de los elementos diferenciales $\pi_C(\Pi_{q^i})$ y $\pi_C(\Pi_{p_i})$. Imponiendo que los elementos dependientes de los operadores diferenciales se anulen, enunciamos el siguiente teorema, cuya demostración se puede encontrar en el Apéndice E.2.

Teorema 3.2.1. *Dado un sistema híbrido descrito por la C^* -álgebra $\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$, una dinámica como la de la Ecuación 3.2.5 con los operadores de Kraus de la forma:*

$$V_k = \left(d_k(\hat{Q}^i, \hat{P}_j) + \sum_{l=1}^n e_{k1l}(\hat{Q}^i, \hat{P}_j)\pi_C(\Pi_{q^l}) + \sum_{l=1}^n e_{k2l}(\hat{Q}^i, \hat{P}_j)\pi_C(\Pi_{p_l}) \right) \otimes a_{kq},$$

$$d_k, e_{k1i}, e_{k2i} \in \pi_C(\mathcal{A}_C), \quad a_k \in \pi_Q(\mathcal{A}_Q), \quad \forall k = 1, \dots, N^2 - 1, \forall i = 1, \dots, n, \quad (3.2.6)$$

donde N es la dimensión de $\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q$ y dado un Hamiltoniano con la forma de la Ecuación (3.1.2) cumpliendo las condiciones del Teorema 3.1.1. Para que la evolución defina un automorfismo externo del subálgebra híbrido $\pi_H(\mathcal{A}_H)$ se debe cumplir:

- los coeficientes de los operadores de Kraus han de cumplir las siguientes ecuaciones:

$$\sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k e_{kij}^2 = 0, \quad \forall i = 1, 2; j = 1, \dots, n, \quad (3.2.7)$$

⁷Denominaremos $\hat{Q}^i = \pi_C(q^i)$ y $\hat{P}_j = \pi_C(p_j)$

- $a_k = a \quad \forall k$ con $e_{kij} \neq 0$ para algún i, j : donde $a \in Z(\mathcal{A}_Q)$ es un elemento del centro⁸ del álgebra \mathcal{A}_Q (véase definición de centro de un álgebra en Definición A.1.3).

Demostración. Ver Apéndice E.2. □

Estudiemos las propiedades físicas que tiene esta dinámica, en particular, veremos si esta dinámica proporciona *back-reaction*, es decir, si un operador puramente clásico deja de serlo con el tiempo. Para ello, considerando un sistema híbrido de una dimensión clásica con Hamiltoniano $H = H_C \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes H_Q + h_c \otimes h_Q$, calcularemos la evolución del operador test $\hat{Q} \otimes \mathbb{I}$:

$$i\hbar \frac{d}{dt}(\hat{Q} \otimes \mathbb{I}) = \cancel{i[h_c, \hat{Q}] \otimes h_Q} + i[H_C, \hat{Q}] \otimes \mathbb{I} + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \sum_{i=1}^n \left(e_{k1i}^\dagger d_{ki} + d_{ki}^\dagger e_{k1i} \right) \otimes a^2. \quad (3.2.8)$$

Vemos que un operador del centro del álgebra \mathcal{A}_Q influye en la dinámica puramente clásica, es decir, el sistema híbrido con la dinámica Lindbladiana tiene *back-reaction* correspondiente a un operador del centro del álgebra cuántica. En los ejemplos que consideraremos, la parte cuántica son dos qubits, por elección de diseño escogeremos $a = S^2$ que es un Casimir del álgebra de Lie cuántica y por tanto está en el centro $Z(\mathcal{A}_Q)$; de esta manera, la parte clásica solamente "verá" el momento angular total de la parte cuántica (ver siguiente capítulo para una demostración numérica).

⁸Por ejemplo, para el caso del espín de una partícula, $a = J^2$ será el momento angular total que es el operador de Casimir y pertenece al centro del álgebra de Lie $\mathfrak{su}(2)$.

Implementación numérica y ejemplos

En este capítulo, implementaremos numéricamente el formalismo de Koopman para poder hacer simulaciones de sistemas híbridos y las dinámicas explicadas en el capítulo anterior. En primer lugar, se realiza un test de una dinámica armónica en un sistema de Koopman para comprobar que la implementación numérica es correcta (véase Apéndice F.1) y, en segundo lugar, se toma un oscilador armónico acoplado a un sistema de dos qubits y se simula una dinámica unitaria y la dinámica Lindbladiana y vemos sus diferencias. Finalmente, vemos que formas de introducir dinámicas Lindbladianas diferentes con los términos de interacción y con operadores de Kraus puramente cuánticos.

4.1. Implementación numérica

Para la simulación de los sistemas híbridos se he empleado la librería [QuTip](#) de [Python](#). El código desarrollado puede encontrarse en [GitHub](#).

Recordemos que un sistema híbrido en el formalismo de Koopman viene descrito como una función de onda de un espacio que tendrá una parte clásica y otra cuántica¹ $\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q$ (véase Sección 2.3). Consideremos un sistema híbrido de 1 dimensión clásica², las funciones de onda clásicas serán elementos del espacio de Hilbert clásico $\mathcal{H}_C = \underbrace{\mathcal{L}^2(\mathbb{R})}_q \otimes \underbrace{\mathcal{L}^2(\mathbb{R})}_p$.

Consideramos el conjunto $\{\phi_n\}_{n=0}^\infty$ de autoestados del oscilador armónico cuántico

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \cdot H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad n = 0, 1, \dots,$$

donde m tendrá interpretación de masa de la partícula, ω es la frecuencia natural del oscilador y

¹En los ejemplos, consideraremos $\mathcal{H}_Q = \mathbb{C}^4$.

²Una dimensión para la posición y otra dimensión para el momento.

$H_n(x)$ es el polinomio de Hermite³ de orden n . Este conjunto forma una base de infinitos términos del espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, por lo que, $\{\phi_n^q \otimes \phi_m^p\}_{n,m=0}^\infty$ formarán base⁴ de \mathcal{H}_C . Sin embargo, para poder tratar estas funciones de onda numéricamente, solo podremos considerar un número finito de elementos de la base de \mathcal{H}_C , es decir, haremos un truncamiento de los infinitos elementos de la base. El número de elementos que se consideren en el tratamiento numérico influirá en la precisión del modelo y en el costo computacional, requiriendo encontrar un equilibrio para cada uso (véase Apéndice F.1). Para la parte cuántica consideraremos un espacio de Hilbert de un sistema de dos qubits que es de dimensión finita.

Supongamos que tenemos un sistema híbrido donde la parte clásica tiene el Hamiltoniano clásico $H_C \in \mathcal{C}^\infty(\mathcal{M})$ y la parte cuántica evoluciona con el Hamiltoniano \hat{H}_Q . A continuación, describiremos este sistema en el formalismo de Koopman. En primer lugar, descomponemos el Hamiltoniano híbrido como se muestra en la Ecuación 3.1.2, es decir, $\hat{H} = \hat{H}_C \otimes \mathbb{I}_Q + \mathbb{I}_C \otimes \hat{H}_Q + \hat{H}_{CQ}$. En segundo lugar, obtenemos el operador de Koopman (véase Ecuación 2.1.5) correspondiente:

$$\hat{L}_C = -i \left(\frac{\partial H_C}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial H_C}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} \right), \quad (4.1.1)$$

y, a partir de dicho operador, obtendremos $\hat{H}_C \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ escribiendo \hat{L}_C en términos de operadores escalera⁵ empleando las identidades: $\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_q + a_q^\dagger)$, $\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_p + a_p^\dagger)$, $\pi_C(\Pi_q) = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a_q - a_q^\dagger)$, $\pi_C(\Pi_p) = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a_p - a_p^\dagger)$. En caso de haber una interacción explícita entre la parte clásica y cuántica, esta irá en \hat{H}_{CQ} de \hat{H} .

4.2. Ejemplos

Consideremos un oscilador armónico clásico acoplado a un sistema de dos qubits en el espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \underbrace{\mathcal{L}^2(\mathbb{R})}_q \otimes \underbrace{\mathcal{L}^2(\mathbb{R})}_p \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \cong \mathcal{L}^2(q) \otimes \mathcal{L}^2(p) \otimes \mathbb{C}^4$. La parte cuántica de este sistema

es la suma de dos espines $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, y tiene como momento angular total $S^2 = \frac{1}{2} \times \frac{1}{2} = 0, 1$. Recordemos que escogemos $a = S^2$, por lo que, la *back-reaction* de la dinámica Lindbladiana solo considera el autovalor del operador de Casimir del álgebra de Lie cuántico, es decir, la parte clásica solo se ve influenciada por el momento angular total de la parte cuántica. En la Ecuación (3.2.8) se puede observar que si el autovalor de a^2 (en nuestro caso $(S^2)^2$) es cero, $\hat{Q} \otimes \mathbb{I}$ seguirá siendo un operador puramente clásico a lo largo del tiempo; por tanto, hace falta que el momento angular total de la parte cuántica sea diferente de cero para que el sistema presente *back-reaction*. Esta es la razón de haber tomado dos qubits en vez de uno, ya que, cuando $S^2 = 1$ debería haber *back-reaction*,

³ $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad n = 0, 1, \dots$

⁴La razón de elegir esta base es que sabemos cómo actúan los operadores escalera en cada elemento de la base, lo que nos facilita el escribir las matrices asociadas a cada operador en dicha base: $a_{q/p} \phi_n^{q/p} = \sqrt{n} \phi_{n-1}^{q/p} \quad n = 1, \dots$ y $a_{q/p}^\dagger \phi_n^{q/p} = \sqrt{n+1} \phi_{n+1}^{q/p} \quad n = 0, \dots$

⁵Nótese que pasamos implícitamente de funciones $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M})$ a operadores definidos con dominio en $\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q$ mediante la representación GNS.

pero cuando $S^2 = 0$ la parte clásica debería estar ciega respecto a la cuántica; comprobaremos estas predicciones teóricas en las simulaciones.

Consideraremos las dos dinámicas expuestas en el trabajo, la dinámica unitaria y la Lindbladiana, y simularemos las evoluciones temporales del sistema correspondiente a cada una. Veremos que solo la dinámica Lindbladiana presenta *back-reaction*, estudiaremos la pureza de la parte clásica y discutiremos los resultados obtenidos. A continuación, verificaremos que, en la dinámica Lindbladiana, que el sistema presente o no *back-reaction* depende de si la parte cuántica del estado inicial es el singlete o no. Además, introduciremos términos puramente cuánticos y de interacción en el Hamiltoniano (ver Ecuación (3.1.2)) y comprobaremos que generan dinámicas diferentes en la parte cuántica. Finalmente, añadiremos un operador de Kraus extra puramente cuántico, a partir de los ya conocidos en sistemas abiertos cuánticos, viendo que también produce dinámicas diferentes.

Véase Apéndice F.2.1 para describir nuestro ejemplo concreto en el formalismo de Koopman.

4.2.1. *Back-reaction*

En primer lugar, pretendemos ver que efectivamente la parte clásica se ve afectada por la parte cuántica siempre que la parte cuántica $S^2 \neq 0$ (estado singlete) con la dinámica Lindbladiana. Para ello, tomaremos un Hamiltoniano puramente clásico ($\hat{H} = \hat{H}_C \otimes \mathbb{I}$) y los estados $|\phi(q, p)\rangle_t$ y $|\phi(q, p)\rangle_s$ con sus respectivas matrices densidad

$$\rho_t = |\phi(q, p)\rangle_t \otimes \langle\phi(q, p)|_t, \quad \rho_s = |\phi(q, p)\rangle_s \otimes \langle\phi(q, p)|_s. \quad (4.2.1)$$

En un sistema cuántico, el hecho de que uno de los subsistemas pierda pureza es un indicativo de que hay entrelazamiento con el resto del sistema. Análogamente, calcularemos la pureza de la parte clásica que es indicativo de que hay *back-reaction* cuando el Hamiltoniano es puramente clásico. La Figura 4.2.1 muestra los resultados de la pureza clásica con el triplete y el singlete. Vemos que, tomando la parte cuántica del estado inicial el triplete, la pureza de la parte clásica decae confirmando que hay *back-reaction*. Sin embargo, con el singlete, la pureza se mantiene constante en la unidad, por lo que, efectivamente, concluimos que no hay correlación entre la parte clásica y cuántica si el estado inicial cuántico es el singlete. Dicho de otra manera, si el estado cuántico inicial es el singlete, no se produce *back-reaction*, tal y como se había predicho teóricamente.

4.2.2. Diferencias entre dinámicas

En segundo lugar, de nuevo con un Hamiltoniano puramente clásico, veamos la diferencia entre la dinámica unitaria y la dinámica Lindbladiana. Consideramos el estado inicial $|\phi(q, p)\rangle_m$ (nótese que no es el singlete) y su correspondiente matriz densidad $\rho_m = |\phi(q, p)\rangle_m \otimes \langle\phi(q, p)|_m$, lo hacemos evolucionar en el tiempo (véase la Ecuación 3.2.4) y calculamos la pureza de la parte clásica⁶; la Figura 4.2.2 muestra el resultado. En primer lugar, la dinámica unitaria mantiene la pureza de la

⁶Haciendo la traza parcial a $\mathcal{L}^2(q) \otimes \mathcal{L}^2(p)$.

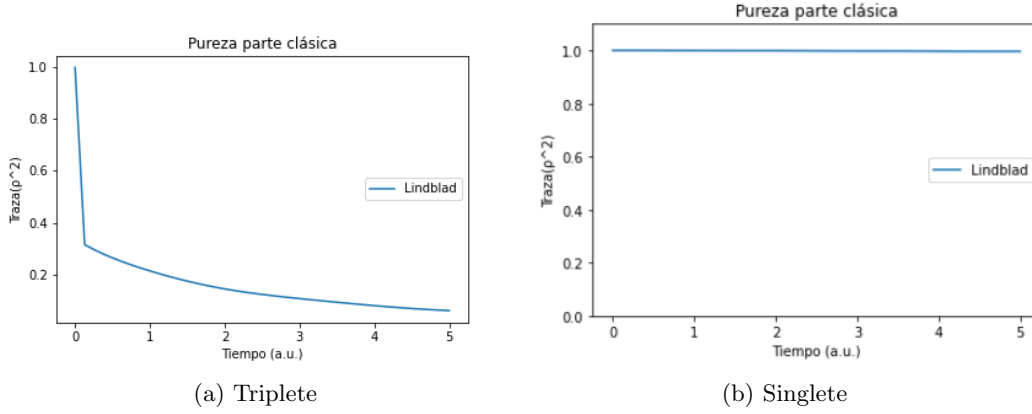


Figura 4.2.1: Pureza de la parte clásica del sistema. Comparativa de la dinámica Lindbladiana en función de la condición inicial cuántica ($N = 5$).

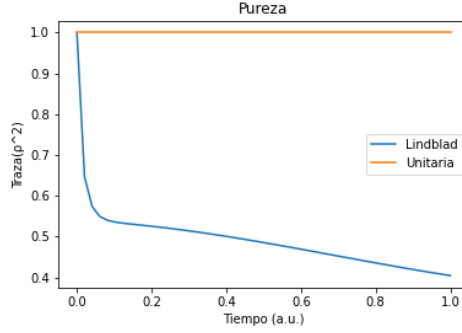


Figura 4.2.2: Evolución de la pureza de la parte clásica para la dinámica unitaria y Lindbladiana con $N = 5$ y el estado cuántico inicial mezcla.

parte clásica como se esperaba, ya que, al no verse afectado por la parte cuántica, la parte clásica sigue la ecuación de Liouville y es en todo momento un estado puro. Sin embargo, se aprecia que la dinámica Lindbladiana hace que la parte clásica pierda pureza⁷. La interpretación de este resultado es que la pérdida de pureza clásica es un fenómeno exclusivo para sistemas híbridos y está relacionado con la correlación que existe entre la parte clásica y la cuántica siempre y cuando el Hamiltoniano sea puramente clásico. Estamos apreciando aquí la generación dinámica de entrelazamiento, como resultado de la formulación de Koopman en términos de espacios de Hilbert.

Esta diferencia entre dinámicas también se puede apreciar en la evolución del espín. A partir de ahora consideraremos (salvo en la parte en la que se estudia la influencia del término de acoplo, donde lo pondremos o lo quitaremos) un Hamiltoniano con parte clásica, cuántica y de interacción:

$$\hat{H} = (-\sqrt{2} \left((a_q + a_q^\dagger)(a_p - a_p^\dagger) - (a_p + a_p^\dagger)(a_q - a_q^\dagger) \right)) \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes S_x + \hat{Q} \otimes S_z. \quad (4.2.2)$$

⁷Esto sucederá cuando haya back-reaction, en este caso, como el estado cuántico inicial no es el singlete ($S = 0$) ocurre este fenómeno.

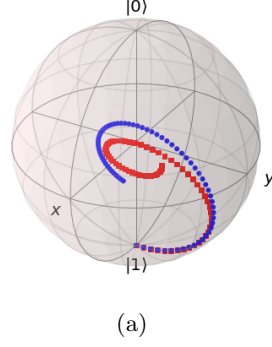


Figura 4.2.3: Diferencia entre la dinámica unitaria y la dinámica Lindbladiana en la evolución cuántica. Esfera de Bloch; dinámica Lindbladiana en azul y dinámica unitaria en rojo. Condiciones iniciales cuánticas $|\uparrow\uparrow\rangle$, operadores de Kraus V_1, V_2 , Hamiltoniano $\hat{H} = (-\sqrt{2} \left((a_q + a_q^\dagger)(a_p - a_p^\dagger) - (a_p + a_p^\dagger)(a_q - a_q^\dagger) \right) \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes S_x + \hat{Q} \otimes S_z$, $T=2,5$ a.u., $N=7$

La Figura 4.2.3 muestra un ejemplo ilustrativo de lo que le ocurre a uno de los espines⁸, vemos que los operadores de Kraus generan una evolución diferente que corresponde al efecto de poner en contacto el sistema híbrido con un baño térmico.

La evolución temporal de los estados también difiere entre la dinámica unitaria y la Lindbladiana (véase la Figura F.2.2 como ejemplo de esta diferencia).

4.2.3. Términos de interacción

Veremos que tenemos formas de generar diferentes dinámicas. Tomemos el Hamiltoniano $\hat{H} = \hat{H}_C \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \hat{H}_Q + \underbrace{h_C \otimes h_Q}_{\hat{H}_{CQ}}$. Por un lado, el término puramente cuántico $\mathbb{I} \otimes \hat{H}_Q$ genera una dinámica en los espines, la cual se manifiesta en la parte clásica; sin embargo, la pureza del sistema total con la dinámica unitaria sigue manteniéndose en la unidad debido a que, con esta dinámica, ambos sistemas evolucionan independientemente. Por otro lado, el término de interacción $h_C \otimes h_Q$ produce una interacción explícita entre la parte clásica y cuántica.

Por un lado, la Figura 4.2.4 muestra el efecto que genera el término $\hat{H}_{CQ} = q \otimes S_z$ en la dinámica de la parte cuántica. La diferencia más relevante se da en la dinámica unitaria, donde deja de preceder sobre el eje x sobre la superficie de la esfera. De esta manera, comprobamos que los términos de interacción generan dinámicas nuevas.

4.2.4. Operador de Kraus puramente cuántico

Hasta ahora hemos considerado operadores de Kraus con la parte clásica lineal respecto a los operadores diferenciales Π_q, Π_p no nula (véase Ecuación F.2.1). Sin embargo, también se pueden

⁸En este ejemplo concreto, debido a la simetría entre ambos espines en la ecuación diferencial y en las condiciones iniciales, ambos qubit tienen la misma evolución.

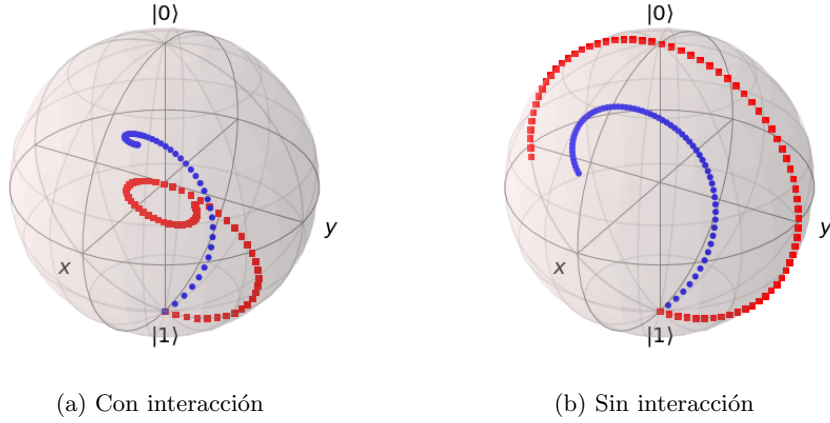


Figura 4.2.4: Diferencias en la evolución por el término H_{CQ} en la esfera de Bloch. Dinámica unitaria en rojo y dinámica Lindbladiana en azul. Condiciones iniciales cuánticas $|\uparrow\uparrow\rangle$, operadores de Kraus V_1, V_2, V_3 , $T=2, 5$ a.u., $N = 7$

introducir operadores de Kraus con la parte clásica trivial y la parte cuántica correspondiente a un operador de Kraus característico de sistemas abiertos (véase [9]); como puede ser el decaimiento de sistemas de 2-niveles⁹. Añadiremos a los operadores de Kraus anteriores el operador de Kraus:

$$V_3 = \mathbb{I}_q \otimes \mathbb{I}_p \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_3 = 1. \quad (4.2.3)$$

La gama de elección de la parte cuántica de estos operadores es amplia y conocida en la literatura [9] y depende del objetivo del modelo, en este caso, este operador produce que el espín del sistema tienda al estado $|\uparrow\uparrow\rangle$. Las Figuras 4.2.3a y ?? muestran dos dinámicas Lindbladianas diferentes: una con los operadores de Kraus V_1 y V_2 y la otra con V_1, V_2 y V_3 . Vemos, efectivamente, que introducir un operador de Kraus puramente cuántico genera una dinámica diferente, queda para futuras investigaciones estudiar el significado físico de las dinámicas que introducen estos operadores de Kraus híbridos.

4.2.5. Resumen

Con este ejemplo hemos ilustrado y verificado las siguientes propiedades de este sistema:

- La dinámica Lindbladiana produce *back-reaction* siempre y cuando la parte cuántica no sea el singlete, a diferencia de la dinámica unitaria donde carece de esta *back-reaction* independientemente del estado cuántico.
- Se puede generar diferentes dinámicas modificando el término de interacción del Hamiltoniano y añadiendo operadores de Kraus puramente cuánticos ya conocidos en la literatura ([9]).

⁹Es una cuestión de diseño, aún no se ha demostrado que este operador genere dicho el mismo comportamiento en la parte cuántica de sistemas híbridos que en sistemas puramente cuánticos

Conclusiones y líneas de trabajo futuro

En este trabajo hemos partido del estudio del formalismo de Koopman para sistemas clásicos. Se han introducido las herramientas matemáticas que permiten un tratamiento más general de sistemas físicos y hemos generalizado la construcción de Koopman a sistemas más generales; en particular, lo hemos adaptado a sistemas híbridos. A continuación, se ha visto que, en este nuevo formalismo de Koopman para sistemas híbridos, una dinámica unitaria no proporcionaba todas propiedades físicas que uno se espera de sistemas híbridos, por lo que, inspirados en sistemas abiertos cuánticos, se ha propuesto una dinámica no unitaria nueva (dinámica Lindbladiana). Se ha comprobado que la dinámica Lindbladiana proporciona mejores propiedades que la dinámica unitaria, pero también se ha expuesto las limitaciones que presenta. Finalmente, se ha tomado un ejemplo sencillo y, mediante herramientas de cálculo numérico, se ha ilustrado y corroborado todas las predicciones teóricas de este trabajo. La principal aportación original de este trabajo puede sintetizarse como: *Se ha hallado una dinámica no unitaria, que corresponde al sistema híbrido en contacto con un baño térmico, bien definida en sistemas híbridos en la cual la parte cuántica se ve influida por la parte clásica, sin embargo, la parte clásica solo recibe una influencia parcial de la cuántica.*

Finalmente, como líneas de trabajo futuro en mecánica estadística híbrida exponemos dos posibles alternativas:

- Viendo que la dinámica Lindbladiana obtenida en este trabajo está bien definida, una posible línea de trabajo es la verificación de si esta dinámica deja invariante el *Hybrid Canonical Ensemble* propuesto en [1] y poder aplicar el formalismo de MaxEnt con el fin de obtener una termodinámica híbrida.
- Dado que la parte clásica recibe una influencia parcial de la parte cuántica, esta dinámica Lindbladiana no reproduce al completo las propiedades que tienen las Ecuaciones de Ehrenfest para sistemas híbridos. Por tanto, otra posible línea de trabajo es la búsqueda de una dinámica no unitaria más general que la Lindbladiana que tenga una *back-reaction* completa.

Bibliografía

- [1] J. L. Alonso, C. Bouthelier, A. Castro, J. Clemente-Gallardo, and J. A. Jover-Galtier. Entropy and canonical ensemble of hybrid quantum classical systems. *Physical Review E*, 102(4):042118, October 2020.
- [2] J. L. Alonso, A. Castro, J. Clemente-Gallardo, J. C. Cuchí, P. Echenique, J. G. Esteve, and F. Falceto. Nonextensive thermodynamic functions in the Schrödinger-Gibbs ensemble. *Physical Review E*, 91(2):022137, February 2015.
- [3] J. L. Alonso, A. Castro, J. Clemente-Gallardo, J. C. Cuchí, P. Echenique, and F. Falceto. Statistics and Nosé formalism for Ehrenfest dynamics. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 44(39):395004, September 2011.
- [4] Folkmar A. Bornemann, Peter Nettesheim, and Christof Schütte. Quantum-classical molecular dynamics as an approximation to full quantum dynamics. *The Journal of Chemical Physics*, 105(3):1074–1083, July 1996.
- [5] Franka Miriam Bruckler. Tensor products of C^* -algebras, operator spaces and Hilbert C^* -modules. *Mathematical Communication*, 4:257–268, 1999.
- [6] C. Bouthelier-Madre, J. Clemente-Gallardo, L. González-Bravo, and D. Martínez-Crespo. Hybrid Koopman C^* -formalism and the hybrid quantum-classical master equation. *arxiv:2306.15601*, June 2023.
- [7] Andrew M. Gleason. Measures on the Closed Subspaces of a Hilbert Space. *Journal of Mathematics and Mechanics*, 6(6):885–893, 1957.
- [8] J.L. Alonso, C. Bouthelier-Madre, J. Clemente-Gallardo, D. Martínez-Crespo, and Javier Pomar. Effective nonlinear Ehrenfest hybrid quantum-classical dynamics. *Accepted for publication in European Physical Journal Plus*, 2023.

- [9] Jorge Alberto Jover Galtier. *Sistemas Cuánticos Abiertos: Descripción Geométrica, Dinámica y Control*. PhD thesis, 2017.
- [10] B. O. Koopman. Hamiltonian Systems and Transformation in Hilbert Space. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 17(5):315–318, May 1931.
- [11] A. Kossakowski. On quantum statistical mechanics of non-Hamiltonian systems. *Reports on Mathematical Physics*, 3(4):247–274, December 1972.
- [12] G. Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, 48(2):119–130, June 1976.
- [13] Takasi Tsurumaru. On the direct-product of operator algebras, I. *Tohoku Mathematical Journal*, 4(3):242–251, January 1952.

Preámbulo matemático

A.1. Álgebra

Definición A.1.1 (Álgebra). Sea $(V_{\mathbb{K}}, +)$ un espacio vectorial sobre el cuerpo \mathbb{K} . Un \mathbb{K} -álgebra es una terna $\mathcal{A} = (V_{\mathbb{K}}, +, \phi)$ donde ϕ es una operación bilineal

$$\phi : V \times V \rightarrow V,$$

es la operación ϕ la que determina el tipo de álgebra: conmutativa, asociativa, Lie, etc.

Se dice que un álgebra \mathcal{A} es un **álgebra con unidad (álgebra unital)** si ella tiene unidad, es decir, existe un elemento $1 \in \mathcal{A} (1 \neq 0)$ tal que $\phi(x, 1) = \phi(1, x) = x \quad (x \in \mathcal{A})$.

Definición A.1.2 (Ideal de un álgebra). Sea \mathcal{A} un álgebra, el subconjunto $J \subset \mathcal{A}$ es un **ideal por la izquierda (por la derecha)** de \mathcal{A} si $x \in \mathcal{A}$ y $y \in J \Rightarrow xy \in J$ ($yx \in J$). Si J es ideal por la izquierda y por la derecha diremos que es un **ideal**. Se dice que un ideal J es **propio** si $J \neq \mathcal{A}$. Un ideal propio que no está contenido en ningún otro ideal propio se denomina **ideal maximal**.

Definición A.1.3 (Centro de un álgebra). Sea \mathcal{A} un álgebra, el conjunto

$$Z(\mathcal{A}) = \{c \in \mathcal{A} \mid ca = ac, \forall a \in \mathcal{A}\},$$

se denomina **centro** del álgebra \mathcal{A} .

Definición A.1.4 (Derivación de un álgebra). Sea $(V_{\mathbb{K}}, +, \phi)$ un álgebra. Llamamos *derivación de un álgebra* a cualquier aplicación lineal

$$D : (V_{\mathbb{K}}, +, \phi) \rightarrow (V_{\mathbb{K}}, +, \phi),$$

que satisface la regla de Leibniz, i.e.

$$D(\phi(a, b)) = \phi(D(a), b) + \phi(a, D(b)) \quad \forall a, b \in V_{\mathbb{K}}.$$

Definición A.1.5. Un **álgebra de Jordan** J es un espacio vectorial real dotado de una operación \circ y una operación \cdot asociativa que satisface que $\forall a, b \in J$:

- \circ es conmutativo: $a \circ b = b \circ a$
- $a \circ (b \circ a^2) = (a \circ b) \circ a^2$ donde $a^2 := a \cdot a$

Definición A.1.6. Un **álgebra de Lie** L es un espacio lineal dotado de una aplicación $[\cdot, \cdot] : L \times L \rightarrow L$ que satisface, $\forall a, b, c \in L$

- $[\cdot, \cdot]$ es anticonmutativo: $[a, b] = -[b, a]$
- la identidad de Jacobi se satisface, i.e.

$$[a, [b, c]] + [c, [a, b]] + [b, [c, a]] = 0$$

Definición A.1.7 (Álgebra de Poisson). Un **álgebra de Poisson** es un espacio vectorial $(V_{\mathbb{K}}, +)$ sobre el cuerpo \mathbb{K} dotada de dos productos bilineales, \cdot y $\{\cdot, \cdot\}$, que tienen las siguientes propiedades:

- El producto \cdot forma una \mathbb{K} -álgebra asociativa.
- El producto $\{\cdot, \cdot\}$, el corchete de Poisson, forma un álgebra de Lie.
- El corchete de Poisson actúa como una derivación del producto asociativo \cdot . De forma que para tres elementos x, y, z en el álgebra, se tiene que $\{x, y \cdot z\} = \{x, y\} \cdot z + y \cdot \{x, z\}$.

Definición A.1.8. Un **álgebra de Lie-Jordan** es un espacio lineal X dotado de dos aplicaciones \circ y $[\cdot, \cdot]$ tal que:

- (X, \circ) es un álgebra de Jordan
- $(X, [\cdot, \cdot])$ es un álgebra de Lie
- $\forall x \in X, [x, \cdot] : X \rightarrow X$ es una derivación del álgebra de Jordan, i.e.

$$[x, y \circ z] = [x, y] \circ z + y \circ [x, z] \quad \forall y, z \in X.$$

- Además, ambas estructuras no son asociativas, pero sus correspondientes asociadores son

proporcionales, i.e., $\exists \lambda \in \mathbb{R}$ que satisface que $\forall a, b, c \in \mathcal{A}^R$,

$$a \circ (b \circ c) - (a \circ b) \circ c = \lambda([a, [b, c]] - [[a, b], c]).$$

Definición A.1.9. Un **espacio de Banach** es un espacio vectorial normado y completo con la métrica definida por su norma

Definición A.1.10. Se dice que \mathcal{A} es un **álgebra de Banach** si en \mathcal{A} está definida una norma para el cual \mathcal{A} es un espacio de Banach y, además,

$$\|xy\| \leq \|x\|\|y\| \quad \forall x, y \in \mathcal{A}.$$

Definición A.1.11. Un álgebra de Lie-Jordan X que es un espacio de Banach se llama **álgebra de Lie-Jordan-Banach (LJB)**

Los LJB álgebras son cruciales ya que son los objetos que capturarán los operadores físicamente más relevantes cuando describamos un sistema físico por una C^* -álgebra. Presentemos la noción de C^* -álgebra.

Definición A.1.12 ($*$ -álgebra). Un álgebra \mathcal{A} se denomina **$*$ -álgebra** si en \mathcal{A} está definida una aplicación $*$: $\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ que satisface las siguientes condiciones ($\forall x, y \in \mathcal{A}, \lambda \in \mathbb{C}$):

- $(x^*)^* = x$,
- $(x + y)^* = x^* + y^*$,
- $(xy)^* = x^*y^*$,
- $(\lambda x)^* = \bar{\lambda}x^*$.

La aplicación $*$ se denomina **involución**. Si $x^* = x$, entonces se dice que el elemento x de la $*$ -álgebra es **hermítico**.

Definición A.1.13 (C^* -álgebra). Un álgebra de Banach que es una $*$ -álgebra se denomina **C^* -álgebra** si para todo elemento x de la misma se cumple la igualdad $\|x^*x\| = \|x\|^2$.

Teorema A.1.1. Sea \mathcal{A} una C^* -álgebra, el subconjunto $J \subset \mathcal{A}$ es un ideal

Proposición A.1.2. El álgebra de Banach $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ de todos los operadores lineales acotados que actúan en un espacio de Hilbert \mathcal{H} con la operación de paso al operador autoadjunto como involución es una C^* -álgebra.

A continuación, vemos que el conjunto de observables de una C^* -álgebra (es decir, los elementos hermíticos del álgebra) tendrá una estructura de álgebra de Lie-Jordan-Banach.

Teorema A.1.3. *Sea \mathcal{A} una C^* -álgebra con la involución $*$ y la norma $\|\cdot\|$. Consideremos el subconjunto de elementos autoadjuntos reales*

$$\mathcal{A}^R = \{x \in \mathcal{A} | a^* = a\},$$

y definamos sobre este las siguientes operaciones:

$$a \circ b = \frac{1}{2}(ab + ba) \quad [a, b] = \frac{-i}{\kappa}(ab - ba).$$

Entonces, $(\mathcal{A}^R, \circ, [\cdot, \cdot], \|\cdot\|)$ es un álgebra de Lie-Jordan-Banach.

Por otro lado, dado un álgebra de LJB, podemos considerar su complexificación y definir una C^* -álgebra que tenga al álgebra original como subálgebra hermítica.

Teorema A.1.4. *Dado un álgebra LJB \mathcal{A}^R , si consideramos su complexificación como un espacio lineal \mathcal{A}^C , y la operación:*

$$a \cdot_{\kappa} b = a \circ b + i\kappa[a, b],$$

el conjunto $(\mathcal{A}^C, \cdot_{\kappa}, \|\cdot\|)$ se vuelve una C^ -álgebra para todo valor de $\kappa \in \mathbb{R}$.*

A continuación, se enunciará el Teorema de Guélfank-Naimark el cual emplea la construcción de Guélfand-Naimark-Segal (GNS) para su demostración. Antes de eso, necesitamos definir ciertos conceptos.

Dada una C^* -álgebra \mathcal{A} , definiremos los estados del mismo, para ello, recurriremos al dual de la C^* -álgebra \mathcal{A}^* . Antes, definimos una norma en \mathcal{A}^* empleando la norma definida sobre \mathcal{A} ,

$$\|\omega\| = \sup\{|\omega(a)|, \|a\| = 1\}.$$

Esto nos permite introducir la noción de positividad que emplearemos en la definición de los estados. Dado $\omega \in \mathcal{A}^*$ decimos que es definido positivo si

$$\omega(a^*a) \geq 0 \quad \forall a \in \mathcal{A}.$$

Definición A.1.14 (Estado). Un **estado** de una C^* -álgebra se define como un funcional lineal definido positivo sobre \mathcal{A} con norma igual a uno.

Definición A.1.15 (Representación). Se denomina **representación** de una C^* -álgebra \mathcal{A} a un par (π, \mathcal{A}) , donde $\pi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$ es un morfismo y \mathcal{H} un espacio de Hilbert.

Se dice que la representación es **cíclica** si existe un vector $\Omega \in \mathcal{H}$ para el cual la variedad lineal $\pi(\mathcal{A})\Omega$ es densa en \mathcal{H} ; en ese caso, Ω se denomina **vector cíclico**. Una representación π es **no degenerada** si $\{\pi(x)a \mid x \in \mathcal{A}; a \in \mathcal{H}\}$ es denso en \mathcal{H} . En particular, una representación cíclica es no degenerada.

Teorema A.1.5 (Teorema de Gelfand-Naimark). *Sea \mathcal{A} una C^* -álgebra, entonces, \mathcal{A} es isométricamente $*$ -isomorfa a una C^* -subálgebra del álgebra $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ de todos los operadores lineales acotados en cierto espacio de Hilbert \mathcal{H} .*

Proposición A.1.6. *Toda representación π no degenerada es suma directa de representaciones cíclicas*

Dada la C^* -álgebra \mathcal{A} , denotando como $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ el conjunto de estados de \mathcal{A} , la **construcción Gelfand-Naimark-Segal (GNS)** consiste en lo siguiente:

1. Dado $\omega \in \mathcal{S}(\mathcal{A})$, definimos la forma sesquilineal $(\cdot, \cdot)_0^\omega$ en \mathcal{A} como

$$(A, B)_0^\omega := \omega(A^*B).$$

Como ω es un estado, esta forma es semidefinida positiva. Su espacio nulo

$$\mathcal{N}_\omega = \{A \in \mathcal{A} \mid \omega(A^*A) = 0\}$$

es un ideal por izquierda en \mathcal{A} .

2. La forma $(\cdot, \cdot)_0^\omega$ se proyecta sobre el producto interno $(\cdot, \cdot)_\omega$ en el cociente $\mathcal{A}/\mathcal{N}_\omega$. Si $V_\omega : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}/\mathcal{N}_\omega$ es la proyección canónica, entonces, por definición

$$(V_\omega A, V_\omega B)_\omega := (A, B)_0^\omega.$$

El espacio de Hilbert \mathcal{H}_ω es la clausura de $\mathcal{A}/\mathcal{N}_\omega \subset \mathcal{H}_\omega$ por

$$\pi_\omega(A)V_\omega B := V_\omega AB;$$

se sigue que π_ω es continuo. Por tanto, $\pi_\omega(A)$ puede extenderse por continuidad a todo \mathcal{H}_ω .

3. El vector cíclico se define como $\Omega_\omega = V_\omega \mathbb{I}$, por tanto,

$$(\Omega_\omega, \pi_\omega(A)\Omega_\omega) = \omega(A) \quad \forall A \in \mathcal{A}.$$

A.1.1. Teorema de Gleason

El Teorema de Gleason nos permitirá asociar una matriz densidad a cada estado físico. Cuando hacemos la representación GNS de una C^* -álgebra, los estados de la misma serán medidas definidas sobre un espacio de Hilbert; es aquí donde entra en juego el Teorema de Gleason, que nos asegura que dada una de estas medidas, existirá una matriz densidad asociada (véase el artículo original de Gleason [7])

Teorema A.1.7 (Gleason). *Sea μ una medida en los subespacios cerrados de un espacio (real o complejo) de Hilbert separable \mathcal{H} de dimensión al menos tres. Existe un operador autoadjunto semidefinido positivo T tal que todo subespacio cerrado A de \mathcal{H}*

$$\mu(A) = \text{Tr}(TP_A), \quad (\text{A.1.1})$$

donde P_A es la proyección ortogonal de \mathcal{H} sobre A .

A.1.2. Teorema de Stone

Teorema A.1.8. *Sea $U(t)$ una representación unitaria de \mathbb{R} , entonces existe un único operador autoadjunto T (denominado operador infinitesimal del grupo $U(t)$) tal que*

$$U(t) = \exp(iTt) \quad t \in \mathbb{R} \quad (\text{A.1.2})$$

Mecánica simpléctica

En esta capítulo haremos un tratamiento riguroso de la descripción de sistemas Hamiltonianos cuyo espacio de fases viene descrito por una variedad diferenciable.

A lo largo del siglo XX, la Mecánica comienza a ser un punto de reunión de diversas disciplinas de las ciencias como la geometría diferencial, el análisis, la física, etc. Implicando un gran avance en la Mecánica. Sus hitos fundacionales se remontan a los inicios del siglo XX con el uso de formas diferenciables en Mecánica en 1922, por obra de Elie Cartan; seguido por la primera exposición moderna sobre sistemas hamiltonianos en variedades simplécticas que apareció en un artículo de G. Reeb en 1952.

Sea \mathcal{N} una variedad diferenciable de dimensión n , en una carta local (U_i, ψ_i) , los elementos de la variedad vienen descritos por las coordenadas $\{q^i\}$ que corresponderán a las coordenadas generalizadas de un sistema físico más adelante. El conjunto de momentos generalizados $\{p_i\}$ serán coordenadas de las fibras del espacio cotangente de \mathcal{N} , $T^*\mathcal{N}$, respecto a la base natural asociada a las coordenadas $\{q^i\}$. Usaremos $T^*\mathcal{N}$ como el espacio de fases de un sistema físico y escribiremos nuestras ecuaciones en el conjunto de coordenadas $\{q^i, p_i\}$.

Definición B.0.1 (Forma de Liouville). Llamamos **forma de Liouville** a la 1-forma $\theta \in \Lambda^1(T^*\mathcal{N})$ que en el conjunto de coordenadas natural tiene la siguiente forma:

$$\theta = p_i dq^i. \quad (\text{B.0.1})$$

Una formulación intrínseca del objeto es el siguiente. Sea $\alpha^*\mathcal{N}$ un punto del espacio cotangente, consideramos el conjunto de vectores tangentes a α , $T_\alpha T^*\mathcal{N}$. La forma de Liouville se define como la 1-forma $\theta \in \Lambda^1(T^*\mathcal{N})$ que satisface:

$$\theta(\alpha)(V) = \alpha(\pi_{*\alpha} V), \quad \forall V \in T_\alpha T^*\mathcal{N}, \quad (\text{B.0.2})$$

donde $\pi : T_\alpha T^*\mathcal{N} \rightarrow T^*\mathcal{N}$ es la proyección natural al espacio cotangente.

Antes de seguir con la forma de Liouville, veamos cómo se define una forma simpléctica.

Definición B.0.2 (Forma simpléctica). Sea \mathcal{M} una variedad diferenciable, una 2-forma $\omega \in \Lambda^2(\mathcal{N})$ es una **forma simpléctica** si y solo si:

- Es cerrada: $d\omega = 0$
- Es no degenerada, i.e. dado un campo vectorial $X \in \mathfrak{X}(T^*\mathcal{N})$, la relación

$$\omega(X, Y) = 0 \quad \forall Y \in \mathfrak{X}(T^*\mathcal{N}),$$

implica que

$$X = 0.$$

Si relajamos la condición de no degeneración, obtenemos una **forma presimpléctica**.

Definición B.0.3 (Variedad simpléctica). Sea \mathcal{M} una variedad diferenciable y ω una forma simpléctica. Llamaremos **variedad simpléctica** al par (\mathcal{M}, ω) .

Hemos visto que dado un espacio de fases dado por el espacio cotangente de una variedad diferenciable, podemos definir naturalmente una forma de Liouville. Dada una forma de Liouville, podemos definir una forma simpléctica y dotar de estructura de variedad diferenciable al espacio de fases.

Definición B.0.4 (Forma simpléctica canónica). Sea $T^*\mathcal{N}$ el espacio cotangente de una variedad diferencial \mathcal{N} . Llamaremos **forma simpléctica canónica** a la 2-forma $\omega \in \Lambda^2(T^*\mathcal{N})$ definido como:

$$\omega = -d\theta \tag{B.0.3}$$

Proposición B.0.1. Sea $T^*\mathcal{N}$ el espacio cotangente de una variedad diferencial \mathcal{N} . La forma simpléctica canónica $\omega \in \Lambda^2(T^*\mathcal{N})$ es una forma antisimétrica y cerrada. Además, ω es no degenerada si

$$\Omega = \underbrace{\omega \wedge \cdots \wedge \omega}_{2n},$$

es una forma de volumen, donde n es la dimensión de \mathcal{N} .

La proposición anterior implica que, como se podía esperar, la forma simpléctica canónica es una forma simpléctica, y el par $(T^*\mathcal{N}, -d\theta)$ es una variedad simpléctica.

Sin embargo, se puede hacer mecánica directamente a partir de un espacio de fases dado por una variedad simpléctica (\mathcal{M}, ω) . Es decir, no necesitamos que el espacio de fases sea el espacio cotangente de otra variedad, como habíamos supuesto hasta ahora. Nos bastará con la forma simpléctica para definir localmente una carta donde podemos considerar como coordenadas $\{q^i, p_i\}$.

Teorema B.0.2 (Darboux, 1882). Sea \mathcal{M} una variedad $2n$ -dimensional. Sea $\omega \in \Lambda^2(\mathcal{M})$ una dos forma no degenerada, luego, $d\omega = 0$ si y solo si hay una carta (U, ψ) en cada punto $p \in \mathcal{M}$ tal que $\psi(p) = 0$ y la expresión de la dos forma en las coordenadas locales correspondientes $\{q^i, p_i\}$ es

$$(\psi^{-1})^*\omega|_U = \sum_{i=1}^n dq^i \wedge dp_i.$$

Definición B.0.5 (Atlas de Darboux). Llamaremos **atlás de Darboux** al atlas definido por las cartas de Darboux.

Definición B.0.6 (Transformación canónica). Sean $(\mathcal{M}_1, \omega_1)$ y $(\mathcal{M}_2, \omega_2)$ dos variedades simplécticas y la transformación $F : \mathcal{M}_1 \rightarrow \mathcal{M}_2$. Esta transformación se llama **transformación canónica** si

$$F^*\omega_2 = \omega_1.$$

Definición B.0.7 (Paréntesis de Poisson). Sea (\mathcal{M}, ω) una variedad simpléctica. Sean $f, g \in \mathcal{C}^\infty(\mathcal{M})$ dos funciones sobre \mathcal{M} y $X_f, X_g \in \mathfrak{X}(\mathcal{M})$ los campo vectoriales Hamiltonianos correspondientes. Definimos el **paréntesis de Poisson** de f y g como la función

$$\{f, g\} := \omega(X_f, X_g). \quad (\text{B.0.4})$$

Debido a que la correspondencia entre funciones y campo vectoriales Hamiltonianos está bien definida, podemos definir una operación en el conjunto de funciones:

$$\begin{aligned} \{\cdot, \cdot\} : \mathcal{C}^\infty(\mathcal{M}) \times \mathcal{C}^\infty(\mathcal{M}) &\rightarrow \mathcal{C}^\infty(\mathcal{M}) \\ f, g &\rightarrow \{f, g\}. \end{aligned} \quad (\text{B.0.5})$$

Definición B.0.8. Sea $T^*\mathcal{M}$ un espacio cotangente y ω la dos forma simpléctica canónica. Introducimos la aplicación:

$$\begin{aligned} \hat{\omega} : T(T^*\mathcal{M}) &\rightarrow T^*T^*\mathcal{M} \\ \hat{\omega}(X) &= \omega(X, \dot{\cdot}). \end{aligned} \quad (\text{B.0.6})$$

Una vez tenemos los ingredientes matemáticos, definamos las ecuaciones de Hamilton en términos geométricos. Sea $T^*\mathcal{M}$ un espacio cotangente, consideremos un Hamiltoniano $H \in \mathcal{C}^\infty(T^*\mathcal{M})$.

Definición B.0.9 (Campo vectorial Hamiltoniano). Sea $T^*\mathcal{M}$ un espacio cotangente con ω su dos forma simpléctica canónica, y $f \in \mathcal{C}^\infty(T^*\mathcal{M})$. Llamaremos **campo vectorial Hamiltoniano** asociado a f al campo vectorial:

$$X_f = \hat{\omega}^{-1}(df). \quad (\text{B.0.7})$$

Definición B.0.10. Sea $T^*\mathcal{M}$ un espacio cotangente, y $H \in \mathcal{C}^\infty(T^*\mathcal{M})$. Decimos que la curva $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow T^*\mathcal{M}$ es una solución de la dinámica Hamiltoniana definida por el Hamiltoniano H si y solo si, la curva es la curva integral del campo vectorial Hamiltoniano X_H que está definido por:

$$\hat{\omega}(X_H) = i_{X_H}\omega = dH. \quad (\text{B.0.8})$$

Definición B.0.11 (Simplectomorfismo). Un **simplectomorfismo** es un difeomorfismo definido sobre una variedad simpléctica, que preserva la forma simpléctica, es decir, el *pullback* de la forma simpléctica ω coincide con la propia forma simpléctica $\Phi^*\omega = \omega$.

Proposición B.0.3. Sea (\mathcal{M}, ω) una variedad simpléctica y X un campo vectorial sobre \mathcal{M} , entonces, son equivalentes:

- X es localmente Hamiltoniano,
- $\mathcal{L}_X\omega = 0$,
- El flujo $\phi_t = \phi(\cdot, t)$ asociado a X es un simplectomorfismo (véase Definición B.0.11), donde \mathcal{L} es la derivada de Lie.

Proposición B.0.4. Sean (\mathcal{M}, ω) una variedad simpléctica y $f : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$ un difeomorfismo local. Son equivalentes:

- f es un simplectomorfismo,
- para todo $H : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$, f es una transformación canónica del sistema (\mathcal{M}, H) ,
- f deja invariante el corchete de Poisson, es decir, para cualesquiera $F, G \in \mathcal{C}^\infty(\mathcal{M})$,

$$\{F \circ G\} \circ f = \{F \circ f, G \circ f\}.$$

Una formulación moderna del Teorema de Liouville es la siguiente:

Corolario B.0.5. Si (\mathcal{M}, ω, H) es un sistema físico, entonces, $\mathcal{L}_{X_H}\omega = 0$.

Debido a la Proposición B.0.3, el corolario anterior implica que el flujo Hamiltoniano es un simplectomorfismo, por lo que preserva el paréntesis de Poisson (véase Proposición B.0.4).

Sin embargo, el siguiente resultado equivalente muestra más el significado físico que el Teorema de Liouville tiene.

Corolario B.0.6. Si (\mathcal{M}, ω, H) es un sistema físico Hamiltoniano $2n$ -dimensional, entonces, ϕ_t preserva el volumen simpléctico $d\Omega = \underbrace{\omega \wedge \cdots \wedge \omega}_n$.

Este resultado supone que el volumen en el espacio de fases se mantiene en la evolución, lo que posibilita la definición consistente de la mecánica estadística.

Formalismo de Koopman

Consideramos un sistema Hamiltoniano clásico definido sobre la variedad simpléctica (\mathcal{M}, ω) . Una densidad de probabilidad $\rho : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ que describe un sistema estadístico clásico sobre el espacio de fases define una medida μ que cumple:

$$\mu(\mathcal{M}) = \int_{\mathcal{M}} d\mu = \int_{\mathcal{M}} \rho d\Omega = 1,$$

donde $d\Omega$ es la medida de Liouville de la variedad simpléctica y está definida como el producto exterior de n copias de la forma simpléctica ω ,

$$d\Omega := \underbrace{\omega \wedge \cdots \wedge \omega}_n.$$

Definimos el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega)$ de funciones de cuadrado integrable sobre \mathcal{M} a partir de la medida simpléctica:

$$\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega) = \left\{ f : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{\mathcal{M}} \bar{f} f d\Omega < \infty \right\}, \quad (\text{C.0.1})$$

junto con su producto escalar

$$\langle f | g \rangle := \int_{\mathcal{M}} \bar{f} g d\Omega \quad \forall f, g \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega). \quad (\text{C.0.2})$$

Sea $\psi : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$ una transformación canónica en \mathcal{M} , esta define un operador unitario sobre $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega)$:

$$U(f) := \psi^* f = f \circ \psi \quad \forall f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega),$$

el cual es lineal y mapea $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega)$ sobre sí mismo. U es una biyección, i.e. $U^{-1}(f) = f \circ \psi^{-1}$. Como ψ es una transformación canónica, define un symplectomorfismo, es decir, preserva la forma

simpléctica $\psi^*\omega = \omega$ (donde ψ^* es el pullback de ψ). Al ser un symplectomorfismo, la transformación ψ preserva la medida $d\mu$, i.e. $d\mu(\psi(x)) = d\mu(x)$, haciendo que el operador U defina una isometría:

$$\|U(f)\|^2 = \int_{\mathcal{M}} U(f)^\dagger U(f) d\mu = \int_{\mathcal{M}} \overline{f(\psi(x))} f(\psi(x)) d\mu(\psi(x)) = \int_{\mathcal{M}} \overline{f(x)} f(x) d\mu(x) = \|f\|^2.$$

Como caso particular de transformación canónica, consideremos el flujo Hamiltoniano clásico dado por el Hamiltoniano $H \in \mathcal{C}^\infty(M)$, $F_t : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$:

$$(x^i(t), p_i(t)) = F_t(x^i(0), p_i(0)) \quad t \in \mathbb{R}.$$

Sea $U_t(f) = f \circ F_t$ el operador unitario en $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega)$ que define esta transformación, si el flujo Hamiltoniano F_t es completo, es decir, está definido $\forall t \in \mathbb{R}$, el operador U_t define un grupo de transformaciones unitarias de un solo parámetro. Además, el Teorema de Stone (Teorema A.1.8) nos asegura que existe un operador autoadjunto \hat{L} tal que

$$U_t = \exp(-i\hat{L}t) \quad \forall t \in \mathbb{R},$$

siendo \hat{L} el operador de Koopman (véase la Definición 2.1.1) que actúa sobre $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega)$ como

$$\hat{L}\phi = -i \left(\frac{\partial H}{\partial q^k} \frac{\partial}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial}{\partial q^k} \right) \phi \quad \forall \phi \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega).$$

En particular, la función de onda $\phi_\rho \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega)$ que cumple:

$$\rho = \bar{\phi}_\rho \phi_\rho, \tag{C.0.3}$$

representa el estado de nuestro sistema estadístico clásico en términos del espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega)$.

De esta manera, se tiene una ecuación de Schrödinger en $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, d\Omega)$ para ϕ_ρ desde la cual se recupera la ecuación de Liouville si se calcula ρ con la Ecuación C.0.3.

$$i\dot{\phi}_\rho = \hat{L}\phi_\rho, \tag{C.0.4}$$

y la ecuación de Von Neumann correspondiente

$$i\dot{\rho} = [\hat{L}, \rho]. \tag{C.0.5}$$

La C^* -álgebra híbrida

En este capítulo, se hará una descripción más rigurosa de las C^* -álgebras de los sistemas clásicos y cuánticos y su extensión a sistemas híbridos.

D.1. Caso clásico

Un sistema clásico tiene definido un espacio de fases \mathcal{M}_C que tendrá estructura de variedad diferenciable, donde cada punto de la variedad corresponde a un *estado* del sistema; por otro lado, los observables serán funciones complejas de clase $C^\infty(\mathcal{M}_C)$ definidas sobre la variedad. De esta manera, para definir la C^* -álgebra correspondiente a un sistema clásico, por simplicidad, se toma el conjunto de funciones complejas de soporte compacto definidos sobre \mathcal{M}_C , $C_C(\mathcal{M}_C) = \{f : K \subset \mathcal{M}_C \rightarrow \mathbb{C} \mid K \text{ compacto}\}$. Para dotarle de estructura de C^* -álgebra buscamos dotarle al conjunto $C_C(\mathcal{M}_C)$ de una estructura de álgebra de Lie-Jordan-Banach, y, a continuación, hacer su complexificación para obtener la C^* -álgebra clásica. Para ello, emplearemos:

- el álgebra con el producto punto a punto \cdot_C
- la conjugación compleja como involución $f^*(x) = \overline{f(x)}$,
- la norma del supremo $\|f\| = \sup\{|f(x)| \mid x \in \mathcal{M}_C\}$.

Por un lado, es inmediato comprobar que el conjunto $\mathcal{A}_C = C_C(\mathcal{M}_C, \mathbb{C})$ tiene estructura de álgebra de Banach y este conjunto contendrá los observables (acotados) físicos del sistema clásico¹. Por otro lado, la estructura de álgebra de Jordan se la dotamos considerando el producto punto a punto como el producto de Jordan y, como el álgebra \mathcal{A}_C es conmutativo, considerando un producto de Lie que se anula. Este álgebra se puede obtener como un límite de la estructura formal donde el producto punto a punto hace el papel de producto de Jordan y la estructura de Lie viene dado por

¹La condición de compacidad no introduce limitaciones físicas.

el corchete de Poisson sobre $C_C^\infty(\mathcal{M}_C)$ que es un subconjunto denso de $C_C(\mathcal{M}_C)$.

Para ver que nuestro álgebra \mathcal{A}_C con las anteriores estructuras es un álgebra de Lie-Jordan-Banach, necesitamos revisar si se cumplen las condiciones de compatibilidad (ver Definición A.1.8):

- La estructura de Lie define una derivación de la estructura de Jordan que se satisface por ser un álgebra de Poisson
- La proporcionalidad de los asociadores no se cumple ya que el producto de Jordan es asociativo pero el álgebra de Poisson no lo es². Sin embargo, tomando el corchete de Poisson canónico sobre el espacio de fases simpléctico \mathcal{M}_C podemos definir una familia de álgebras de Lie de la forma

$$\{a, b\}_\lambda := -i\lambda\{a, b\},$$

que define un corchete de Poisson trivial en el límite $\lambda \rightarrow 0$.

Por tanto, la familia de álgebras $(C_C(\mathcal{M}), \cdot_C, \{\cdot, \cdot\}_\lambda)$ define una LJB trivial en el límite $\lambda \rightarrow 0$; denotemos este LJB como \mathcal{A}^R . Empleando el Teorema A.1.4 podemos obtener la C^* -álgebra cuyo producto vendrá dado por:

$$a \cdot_C b = a \circ b + \lambda\{a, b\} \quad \text{con} \quad \lambda \rightarrow 0. \quad (\text{D.1.1})$$

D.2. Caso cuántico

Consideremos, por simplicidad, el álgebra de operadores acotados $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ sobre el espacio de Hilbert \mathcal{H} respecto a la composición, el adjunto hermítico como involución $A^* = A^\dagger$ y la norma del operador A :

$$\|A\| = \sup\{\|A\phi\|, \quad \phi \in \mathcal{H}, \|\phi\| = 1\}. \quad (\text{D.2.1})$$

Por la Proposición A.1.2, $\mathcal{A}_Q = \mathcal{B}(\mathcal{H})$ es una C^* -álgebra. Este C^* -álgebra contiene el conjunto de observables, que corresponden al subconjunto de operadores autoadjuntos:

$$L = \{A \in \mathcal{A}_Q \mid A^\dagger = A\}.$$

Podemos dotar al conjunto L de una estructura de Lie-Jordan-Banach empleando el Teorema A.1.3 considerando:

- El álgebra de Jordan definido simetrizando el producto asociativo de \mathcal{A}_Q :

$$A \circ_Q B = \frac{1}{2}(A \cdot_Q B + B \circ_Q A),$$

²Debido a la identidad de Jacobi que cumple el corchete de Poisson.

- El álgebra de Lie definido por la parte antisimétrica multiplicado por el elemento imaginario i :

$$[A, B] = -\frac{i}{2\hbar}(A \cdot_Q B - B \cdot_Q A).$$

Ambas operaciones son compatibles entre sí en el sentido de la Definición A.1.8 y, dotado de la norma de la Ecuación D.2.1, L tiene una estructura de álgebra de Lie-Jordan-Banach. El Teorema A.1.4 nos permite recuperar el producto de la C^* -álgebra como una combinación de los productos de Jordan y de Lie con $\kappa = \hbar$:

$$A \cdot_Q B = A \circ_Q B + i\hbar[A, B].$$

D.3. C^* -álgebra híbrida

Construiremos la C^* -álgebra híbrida \mathcal{A}_H a partir de las clásicas y cuánticas, \mathcal{A}_C y \mathcal{A}_Q respectivamente. A continuación, caracterizaremos el conjunto de observables de un sistema híbrido empleando el Teorema A.1.3.

Tomemos el producto tensorial de las C^* -álgebras cuántico y clásico: $\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$. El producto híbrido está definido por los productos clásicos y cuánticos:

$$\begin{aligned} (a \otimes A) \cdot_H (b \otimes B) &:= (a \cdot_C b) \otimes (A \cdot_Q B) = \lim_{\kappa \rightarrow 0} (a \circ b + i\kappa\{a, b\}) \otimes (A \circ B + i\hbar[A, B]) = \\ &= (a \circ b) \otimes (A \circ B) + i\hbar(a \circ b) \otimes [A, B] + \lim_{\kappa \rightarrow 0} i\kappa\{a, b\} \otimes (A \circ B + i\hbar[A, B]) = \\ &= (a \circ b) \otimes (A \circ B) + i\hbar(a \circ b) \otimes [A, B] \quad \forall a, b \in \mathcal{A}_C, A, B \in \mathcal{A}_Q, \quad (\text{D.3.1}) \end{aligned}$$

de donde vemos claramente el producto de Jordan y el de Lie de la estructura de Lie-Jordan híbrido:

- $(a \otimes A) \circ_H (b \otimes B) = (a \circ b) \otimes (A \circ B)$
- $[(a \otimes A), (b \otimes B)] = (a \circ b) \otimes [A, B]$

La involución vendrá dada por las involuciones clásicas y cuánticas. El conjunto de elementos de la forma

$$f = \sum_k \gamma_k a_k \otimes A_k, \quad \gamma_k \in \mathbb{C}, a_k \in \mathcal{A}_C, A_k \in \mathcal{A}_Q,$$

con el producto híbrido dado por la Ecuación D.3.1 tiene estructura de álgebra y lo denotaremos \mathcal{A}_H . En dicho álgebra, definimos la involución como

$$f^* = \sum_k \bar{\gamma}_k a_k^* \otimes A_k^\dagger,$$

donde a_k^* y A_k^\dagger representan las involuciones clásica y cuántica, respectivamente.

En cuanto a la norma (véase [5] y [13] para exposiciones más detalladas), consideraremos la *norma espacial* definido por la inclusión de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C) \otimes \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$ en $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$ y la definición de una representación

$$\pi_H = \pi_C \otimes \pi_Q,$$

y la norma

$$\|f\| = \|\pi_H(f)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)}.$$

Resultados auxiliares

E.1. Definición [E.1.1](#)

Definición E.1.1. Sea una aplicación lineal $L : \text{Herm}(\mathcal{H}) \rightarrow \text{Herm}(\mathcal{H})$, con \mathcal{H} un espacio de Hilbert complejo, se dice que es positivo si la imagen de un elemento positivo¹ es un elemento positivo. El mapa L se dice que es **completamente positivo** si, para todo espacio de Hilbert complejo \mathcal{H}' , el mapa $L \otimes \mathbb{I}_d : \text{Herm}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}') \rightarrow \text{Herm}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}')$ es positivo.

E.2. Teorema [3.2.1](#)

Demostración. Consideremos, por hipótesis, un Hamiltoniano con la forma de la Ecuación [\(3.1.2\)](#) cumpliendo las condiciones del Teorema [3.1.1](#) y los operadores de Kraus de la forma de la Ecuación [\(3.2.6\)](#). Buscamos que la evolución Lindbladiana deje invariante el subespacio híbrido, es decir, que

$$L^\dagger(\pi_H(\mathcal{A}_H)) \subset \pi_H(\mathcal{A}_H).$$

¹Un elemento $\psi \in \mathcal{H}$ de un espacio de Hilbert \mathcal{H} es positivo si $\langle \psi | \psi \rangle > 0$ con el producto escalar.

Para ello, descomponemos $\pi_H(\mathcal{A}_H) = \pi_C(\mathcal{A}_C) \otimes \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$ y calculamos $L^\dagger(\pi_C(\mathcal{A}_C) \otimes \pi_Q(\mathcal{A}_Q))$:

$$\begin{aligned}
L^\dagger(\pi_C(\mathcal{A}_C) \otimes \pi_Q(\mathcal{A}_Q)) = & \\
= \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \Bigg\{ & \left(d_k^\dagger \pi_C(\mathcal{A}_C) d_k + \sum_{i=g,p} \sum_{s=0}^n \left(d_k^\dagger e_{kis} \pi_C(\mathcal{A}_C) \Pi_{is} + \Pi_{is}^\dagger \pi_C(\mathcal{A}_C) e_{kis}^\dagger d_k + \right. \right. \\
& \left. \left. \sum_{j=q,p} \sum_{t=1}^n \left(\Pi_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \pi_C(\mathcal{A}_C) e_{kjt} \Pi_{jt} \right) \right) \right) \otimes (a_{kq}^\dagger \pi_Q(\mathcal{A}_Q) a_{kq}) - \\
& - \frac{1}{2} \left(d_k^\dagger d_k \pi_C(\mathcal{A}_C) + \sum_{i=g,p} \sum_{s=0}^n \left(d_k^\dagger e_{kis} \Pi_{is} \pi_C(\mathcal{A}_C) + \Pi_{is}^\dagger \pi_C(\mathcal{A}_C) e_{kis}^\dagger d_k + \right. \right. \\
& \left. \left. \sum_{j=q,p} \sum_{t=1}^n \left(\Pi_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjt} \Pi_{jt} \pi_C(\mathcal{A}_C) \right) \right) \right) \otimes (a_{kq}^\dagger a_{kq} \pi_Q(\mathcal{A}_Q)) - \\
& - \frac{1}{2} \left(\pi_C(\mathcal{A}_C) d_k^\dagger d_k + \sum_{i=g,p} \sum_{s=0}^n \left(d_k^\dagger e_{kis} \pi_C(\mathcal{A}_C) \Pi_{is} + \pi_C(\mathcal{A}_C) \Pi_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger d_k + \right. \right. \\
& \left. \left. \sum_{j=q,p} \sum_{t=1}^n \left(\pi_C(\mathcal{A}_C) \Pi_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjt} \Pi_{jt} \right) \right) \right) \otimes (a_{kq}^\dagger a_{kq} \pi_Q(\mathcal{A}_Q)) \Bigg\}. \quad (\text{E.2.1})
\end{aligned}$$

Que un operador esté en $\pi_H(\mathcal{A}_H)$ no supone ninguna restricción a la parte cuántica pero la parte clásica solo puede depender de las coordendas canónicas (q^i, p_j) o dicho de otra manera, los términos derivativos han de anularse. La única manera que se cumpla eso es que se cumplan las siguientes condiciones:

1. $a = a_{kq}^\dagger \pi_Q(\mathcal{A}_Q) a_{kq} = a_{kq}^\dagger a_{kq} \pi_Q(\mathcal{A}_Q) = \pi_Q(\mathcal{A}_Q) a_{kq}^\dagger a_{kq}, \quad \forall k$; o lo que es lo mismo, $a_{kq} = a_{lq}, \forall k, l$ y $[a_{kq}, \pi_Q(\mathcal{A}_Q)], \forall k$.
2. Los siguientes términos han de pertenecer a $\pi_C(\mathcal{A}_C)$:

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \Big\{ & \Pi_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \pi_C(\mathcal{A}_C) e_{kjt} \Pi_{jt} - \frac{1}{2} \pi_C(\mathcal{A}_C) \Pi_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjt} \Pi_{jt} - \\
& - \frac{1}{2} \Pi_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjt} \Pi_{jt} \pi_C(\mathcal{A}_C) \Big\} \in \pi_C(\mathcal{A}_C), \quad \forall i, j = q, p \forall s, t = 1, \dots, n, \quad (\text{E.2.2})
\end{aligned}$$

$$\sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \Big\{ d_k^\dagger e_{kis} [\pi_C(\mathcal{A}_C), \Pi_{is}] \in \pi_C(\mathcal{A}_C), \quad i = q, p; s = 1, \dots, n, \quad (\text{E.2.3})$$

$$\sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \Big\{ [\Pi_{is}, \pi_C(\mathcal{A}_C)] d_k e_{kis}^\dagger \in \pi_C(\mathcal{A}_C), \quad i = q, p; s = 1, \dots, n, \quad (\text{E.2.4})$$

De la condicion 1 se obtiene que las partes cuánticas de todos los operadores de Kraus han de ser iguales y parte del centro del álgebra (conmutan con todos los elementos del álgebra).

Como $[\Pi_{is}, \pi_C(\mathcal{A}_C)] \in \pi_C(\mathcal{A}_C) \quad \forall i = q, p; \forall s = 1, \dots, n$, solo debemos imponer la condición de la Ecuación (E.2.2). Para que se cumpla dicha ecuación, además debemos imponer que

$$\sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k e_{kij}^2 = 0, \quad \forall i = q, p; j = 1, \dots, n. \quad (\text{E.2.5})$$

□

Implementación numérica

F.1. Test

Con el objetivo de comprobar la correcta implementación numérica de los sistemas híbridos, se ha simulado un oscilador armónico empleando el formalismo de Koopman y se ha verificado, sabiendo de antemano el comportamiento teórico del mismo, que todo funciona correctamente.

Consideraremos que la parte cuántica del Hamiltoniano híbrido es trivial, es decir, $\hat{H} = \hat{H}_C \otimes \hat{\mathbb{I}}$. Tomemos el Hamiltoniano clásico de un oscilador armónico¹ $H_C = p^2 + q^2$ y obtengamos el operador de Koopman correspondiente a este Hamiltoniano (véase Ecuación 2.1.5):

$$\hat{L}_C = -i \left(\frac{\partial H_C}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial H_C}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} \right) = -2i \left(q \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q} \right), \quad (\text{F.1.1})$$

y lo escribimos en función de los operadores escalera y obtenemos el operador de Koopman:

$$\hat{L}_C = -\sqrt{2} \left((a_q + a_q^\dagger)(a_p - a_p^\dagger) - (a_p + a_p^\dagger)(a_q - a_q^\dagger) \right). \quad (\text{F.1.2})$$

Debido a que se trata de una simulación numérica, la base $\{\phi_n^q \otimes \phi_m^p\}_{n,m=0}^N$ tiene un número finito de elementos. El número de polinomios de Hermite que se toman (N) influye en la evolución del sistema híbrido. Si se considera solamente uno o dos polinomios de Hermite, el sistema no evoluciona debido a que los operadores escalera pueden anular el estado; a medida que se aumenta el número de polinomios de Hermite, la evolución tiende asintóticamente a la evolución real del sistema. Mencionar también que el número de polinomios a escoger depende también de los grados de polinomios de Hermite que consideramos como condición inicial; es decir, si la densidad de probabilidad clásica inicial, al descomponerlo en los polinomios de Hermite, toma valor en polinomios de grado alto, el número N ha de aumentar para una evolución fiel a la realidad, con el coste computacional que aquello conlleva.

¹Despreciaremos las constantes ya que no aportan nada en este test.

En los ejemplos tratados en esta sección, como el polinomio de Hermite del estado inicial de mayor grado era 1 (correspondiente a la densidad de probabilidad del momento), con un valor $N = 5$ la evolución era bastante precisa. A esta conclusión se ha llegado simulando el sistema híbrido con el singlete, ya que, en este caso, la parte clásica no recibe influencia de la parte cuántica. Y se ha comparado con la dinámica que se espera de un oscilador armónico clásico en el espacio de fases, que es una rotación en torno al punto $(q_0, 0)$ donde q_0 es la longitud natural del oscilador (en nuestro caso $q_0 = 0$).

F.2. Simulación numérica

F.2.1. Koopman en este ejemplo

Necesitamos obtener el Hamiltoniano clásico sobre $\mathcal{L}^2(q) \otimes \mathcal{L}^2(p)$, para ello, calculamos $\hat{L}_C = -2i \left(q \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q} \right)$ y lo escribimos en términos de operadores escalera

$$\hat{H}_C = -\sqrt{2} \left((a_q + a_q^\dagger)(a_p - a_p^\dagger) - (a_p + a_p^\dagger)(a_q - a_q^\dagger) \right)$$

Consideraremos los N primeros polinomios de Hermite² y la base clásica $\{\phi_n\}_{n=0}^N$. Para la parte cuántica, consideraremos el CSCO (S^2, S_z) .

La dinámica Lindbladiana viene determinada por los operadores de Kraus (véase Ecuación (3.2.2)), para la simulación tomaremos dos operadores de Kraus³:

$$\gamma_0 = -\gamma_1 = 1, \quad V_1 = \left(6\hat{Q} + \Pi_q - \Pi_p \right) \otimes S^2, \quad V_2 = \left(4\hat{P} - \Pi_q + \Pi_p \right) \otimes S^2, \quad (\text{F.2.1})$$

y los siguientes estados como condiciones iniciales:

$$\begin{aligned} |\phi(\hat{Q}, \hat{P})\rangle_{\text{triplete}} &= \phi_0^q(\hat{Q}) \otimes \phi_1^p(\hat{P}) \otimes |10\rangle, \\ |\phi(\hat{Q}, \hat{P})\rangle_{\text{singlete}} &= \phi_0^q(\hat{Q}) \otimes \phi_1^p(\hat{P}) \otimes |00\rangle, \\ |\phi(\hat{Q}, \hat{P})\rangle_{\text{mezcla}} &= \phi_0^q(\hat{Q}) \otimes \phi_1^p(\hat{P}) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|10\rangle + |00\rangle), \end{aligned} \quad (\text{F.2.2})$$

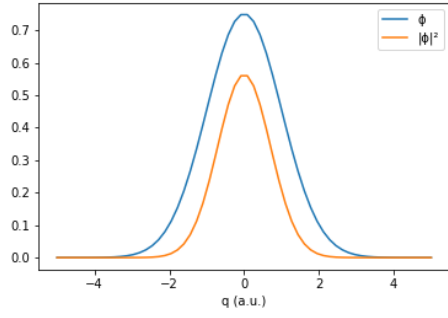
los tres estados comparten el estado de la parte clásica. Recordemos que para recuperar la distribución de probabilidad clásica hay que elevar al cuadrado el módulo de la función de onda, en este caso, $\rho_q(\hat{Q}) = |\phi_0^q(\hat{Q})|^2$ y $\rho_p(\hat{P}) = |\phi_1^p(\hat{P})|^2$ (véase la Figura F.2.1a y F.2.1b). La Figura F.2.1c muestra la densidad de probabilidad inicial en una carta del espacio de fases.

F.2.2. Simulación

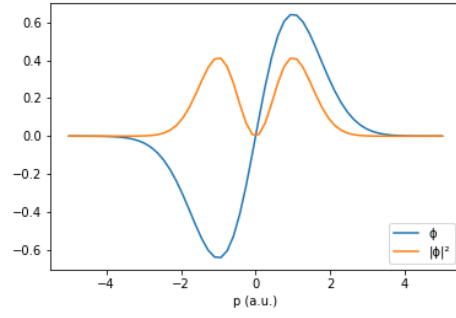
En la Figura F.2.1 se muestra la densidad de probabilidad clásica que hemos considerado como condición inicial, en concreto, se trata de la función de onda $\phi(q, p) = \phi_0^q(q) \otimes \phi_1^p(p)$. La Figura

²Realmente son los primeros N autoestados de un oscilador armónico cuántico, sin embargo, a partir de ahora, cuando nos mencionemos los polinomios de Hermite, en realidad, nos estaremos refiriendo a los autoestados del oscilador armónico cuántico (que son proporcionales a dichos polinomios).

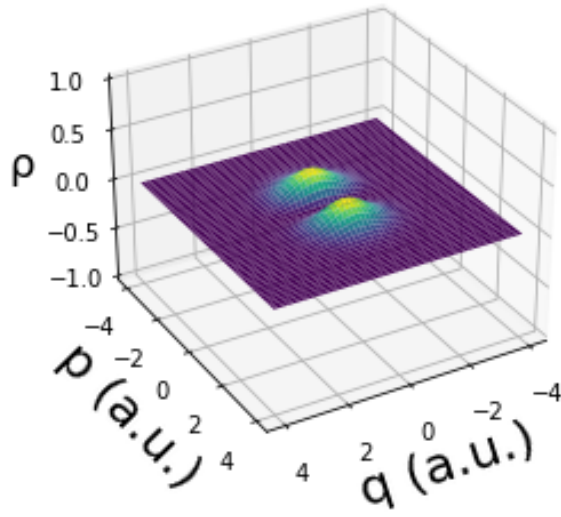
³Recordemos que $\Pi_q = \pi_C \left(\frac{\partial}{\partial q} \right)$, $\Pi_p = \pi_C \left(\frac{\partial}{\partial p} \right)$, $\hat{Q} = \pi_C(q)$ y $\hat{P} = \pi_C(p)$.



(a) Posición



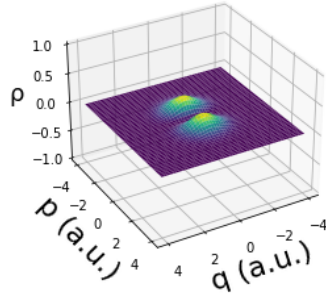
(b) Momento



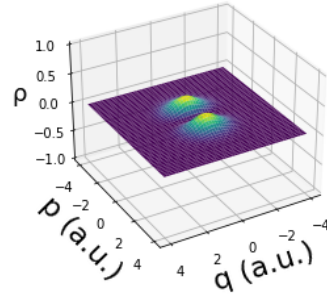
(c) Densidad de probabilidad inicial en el espacio de fases

Figura F.2.1: Condición inicial clásica.

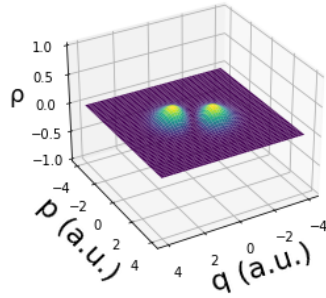
[F.2.2](#) muestra tres fotogramas de las dos dinámicas estudiadas en este trabajo para ilustrar sus diferencias, animaciones de las simulaciones pueden hallarse en [GitHub](#).



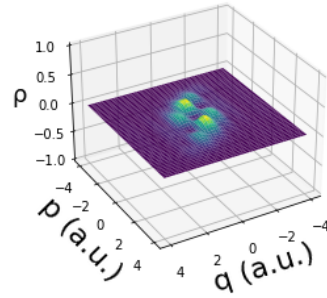
(a) Unitaria $T = 1$ a.u.



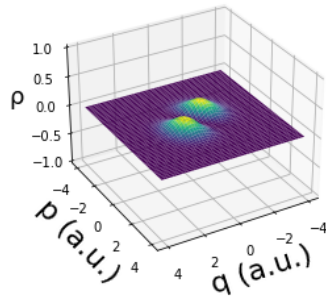
(b) Lindblad $T = 1$ a.u.



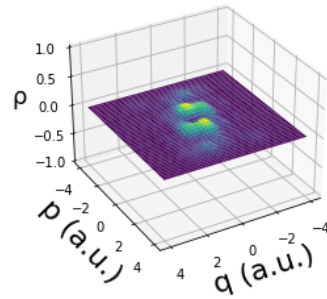
(c) Unitaria $T = 2$ a.u.



(d) Lindblad $T = 2$ a.u.



(e) Unitaria $T = 3$ a.u.



(f) Lindblad $T = 3$ a.u.

Figura F.2.2: Simulaciones del sistema híbrido $N = 7$