

# Nuestra Facultad

## TESIS DOCTORALES

### RESUMEN DE TESIS: THE THEORY OF COARSE-GRAINING WITHOUT PROJECTION OPERATORS

Maxwell, Boltzmann, Gibbs y Einstein, los grandes hombres de la mecánica estadística, decidieron enfrentarse a un problema de dinámica newtoniana aparentemente irresoluble: describir el comportamiento de sistemas formados por muchísimas partículas en interacción. Si el movimiento exacto de sólo tres masas, el sistema Sol-Tierra-Luna, se había resistido incluso a los esfuerzos hercúleos de Lagrange, ¿qué esperanza quedaba de encontrar respuestas en situaciones con muchos más cuerpos en movimiento, como los anillos de Saturno o, peor, los átomos que componen una sustancia? Aún suponiendo que pudiéramos medir el estado de cada átomo (su posición y su velocidad), en la práctica ni siquiera podríamos listar toda esta información, pues unos pocos gramos de materia contienen del orden de  $10^{23}$  átomos, suficiente como para llenar de información miles de millones de discos duros. Además, el ilustre matemático Henri Poincaré había demostrado ya que en el problema general de tres cuerpos los astros dibujaban con su movimiento figuras muchísimo más intrincadas de lo que se había supuesto hasta entonces, ¿cuánto más complejas serían entonces las trayectorias de los átomos?

Sorprendentemente, nuestros héroes decidieron abordar el problema basándose *precisamente* en el carácter impredecible de las trayectorias, sumando el punto de vista estadístico al análisis de fenómenos físicos. Para explicar este nuevo enfoque, partimos de una paradoja aparente. Imaginamos el mundo microscópico como un caos de partículas entrechocando a gran velocidad, pero en el mundo macroscópico de nuestra experiencia vemos objetos con propiedades estables. A pesar de las frenéticas idas y venidas de cada molécula de agua en una taza de té, por poner un ejemplo concreto, a nosotros el contenido de la taza se nos presenta en calma. ¿Será más apacible el mundo atómico de lo que supusimos? No. Si observamos bajo el microscopio una partícula de polen suspendida en el té, vemos un tembleque constante que da lugar a un movimiento errático. Einstein demostró que estamos ante los efectos de los continuos impactos de los átomos del fluido circundante. Por tanto, las características estables tales como

el volumen que ocupa el té en la taza emergen como el efecto promediado de la miríada de estados microscópicos que atraviesan los átomos.

Dada la complejidad del cambio microscópico, podemos dar por sentado que un sistema pasará a la larga por muchísimos estados diferentes, así que calculamos los valores de magnitudes macroscópicas como el volumen, la presión o la temperatura hallando sus promedios sobre todos los estados microscópicos a los que puede acceder nuestro sistema. La validez de esta hipótesis, conocida como la hipótesis de *ergodicidad*, depende de que el sistema se encuentre en equilibrio, es decir, que los valores de las magnitudes que observamos no cambien en el tiempo.

Ahora bien, en cuanto queremos describir un fenómeno dinámico (cómo se mezcla la leche con el té, o cómo se calienta y se enfría la taza) nos encontramos en el campo de la mecánica estadística fuera del equilibrio y todavía no hay acuerdo sobre cómo calcular los promedios o los estados microscópicos a tener en cuenta, especialmente para fenómenos lejos del equilibrio. Es decir, para deducir las leyes macroscópicas de la termodinámica de procesos irreversibles necesitamos un enfoque diferente.

A principios de los años cincuenta, M. S. Green dedujo las ecuaciones para magnitudes macroscópicas en procesos termodinámicos sin memoria, es decir, en los que el estado futuro del sistema depende solamente del estado presente y no de lo que haya ocurrido antes. Muchos sistemas se comportan de esta manera. En nuestra taza de té, la temperatura dentro de un minuto depende solamente de su estado ahora, y no importa si hace un minuto estaba más caliente o si estaba más fría y la hemos recalentado. En las ecuaciones de Green aparecen factores (conocidos ahora como *coeficientes de Green-Kubo*) que resultaron ser promedios *de equilibrio*, es decir, al menos en principio se podían obtener las ecuaciones de procesos termodinámicos sin memoria utilizando la teoría ya conocida de la mecánica estadística, o métodos numéricos bien establecidos.

En la década siguiente, R. Zwanzig utilizó la técnica matemática de los operadores de proyección para escribir las ecuaciones generales macroscópicas que emergen de cualquier dinámica microscópica hamiltoniana, clásica o cuántica, con o sin memoria. En los casos en los que el sistema “se olvidaba” rápidamente de su pasado, estas ecuaciones se aproximaban a

las de Green. Sin embargo, las ecuaciones de Zwanzig contenían coeficientes que normalmente no se podían calcular directamente con mecánica estadística, y el problema tampoco podía abordarse numéricamente debido a que en esta ocasión los promedios involucraban una dinámica *proyectada* muy difícil de tratar, en lugar de la dinámica real de los componentes microscópicos. La respuesta habitual consiste en suponer que el proceso macroscópico no tiene memoria, que los coeficientes se pueden aproximar mediante los de Green-Kubo y, pasados unos meses de trabajo duro y simulaciones, encontrarse con la desagradable sorpresa de que tales hipótesis no eran válidas.

En mi investigación, comencé repensando los pasos de la historia que acabo de relatar. Esta tarea de revisión produjo algunos descubrimientos de naturaleza técnica, como una formulación alternativa de las relaciones de fluctuación (válida tanto para sistemas Hamiltonianos como para procesos estocásticos sin memoria), un algoritmo simpléctico de integración numérica computacionalmente reversible y una forma alternativa de inferir colectividades estadísticas. También desveló orígenes históricos plausibles para dos algoritmos utilizados en la simulación de sistemas en contacto con un foco térmico. Pero sin duda la contribución más importante fue el descubrimiento de un método para derivar ecuaciones como las de Zwanzig sin recurrir a la técnica de operadores de proyección.

El interés de la nueva formulación no reside tanto en la ausencia del formalismo de operadores de proyección, sino en que no aparecen las *dinámicas* proyectadas en las ecuaciones. En efecto, las expresiones incluyen sólo la dinámica real de los componentes microscópicos, susceptible de simulación numérica en muchos casos. Creemos que con las nuevas expresiones estimaremos de manera más acertada del error cometido al eliminar términos de la ecuación y que, además, podremos abordar el estudio de procesos con memoria. Pero aquí nos hemos topado con los objetivos de investigaciones futuras, por lo que añadir más detalles equivale a especular.

A hombros de los gigantes Maxwell, Boltzmann, Gibbs y Einstein, por utilizar la metáfora que popularizó Newton, he podido ver lo suficientemente lejos como para dar un pequeño paso en la descripción del comportamiento de sistemas de muchas partículas; un paso interesante pero humilde. Aunque ya tenemos las ecuaciones generales de la termodinámica irreversible que emergen de la dinámica microscópica, son expresiones tan difíciles de tratar que no veo cómo se podría dar un paso grande sin ser un gigante.

Marc Meléndez Schofield  
*Dpto. de Física Fundamental*