

Métodos Computacionales para Billares Clásicos y Cuánticos

Yulián Andrés Álvarez Ballesteros, José Luis del Río-Correa

Departamento de Física, UAM- Iztapalapa, México D.F., México

Teléfono (55) 5804-4617 Fax (55) 5804-4610

E-mail: yaalvarezb@unal.edu.co; jlrc@xanum.uam.mx

Resumen — En este trabajo se presentan dos métodos computacionales introductorios al caos cuántico aplicado a billares. Primero se estudia la descomposición en modos dinámicos para reconstruir trayectorias en un billar clásico. Para un estadio, localmente el modelo se ajusta satisfactoriamente con una reducción de dimensionalidad r grande con respecto al tiempo de observación. También se realiza un breve estudio del método de integral de contorno para encontrar los valores y funciones propias de la ecuación de Helmholtz con condiciones de frontera dadas.

Palabras Clave – Billar clásico, Billar cuántico, Descomposición en modos dinámicos, Método de integral de contorno.

Abstract — In this work two introductory computational methods to quantum chaos applied to billiards are presented. First, dynamic mode decomposition is studied to reconstruct trajectories in classical billiards. For a stage, locally the model fits satisfactorily with a large dimensionality reduction r with respect to the observation time. A brief study of the contour integral method to find the eigenvalues and eigenfunctions of the Helmholtz equation with given boundary conditions is also made.

Keywords—Classic billiards, Quantum billiards, Decomposition in dynamic modes, Contour integral method.

I. INTRODUCCIÓN

Encontrar las relaciones existentes entre sistemas clásicos y cuánticos ha sido un reto importante para el caos cuántico (caología cuántica [1]), en particular establecer la integrabilidad o el carácter caótico de un sistema clásico a partir del estudio del análogo cuántico y del conteo de nodos [9].

Estudiar las trayectorias trazadas por una partícula moviéndose libremente dentro de un billar y chocando con sus paredes rígidas siguiendo la ley de Snell ha sido un problema de interés en el campo de los sistemas dinámicos [13] y de la mecánica clásica, ya que, el sistema presenta todos los diferentes tipos de integrabilidad [10] y que también puede presentar un comportamiento caótico que dependerá de la forma del billar. Dos de los principales retos son: Conocer el comportamiento a largo plazo de las trayectorias y

encontrar las diferentes órbitas periódicas (cíclicas) junto con sus características.

Los billares cuánticos son pozos de potencial (en este caso bidimensionales) que confinan las partículas dentro de

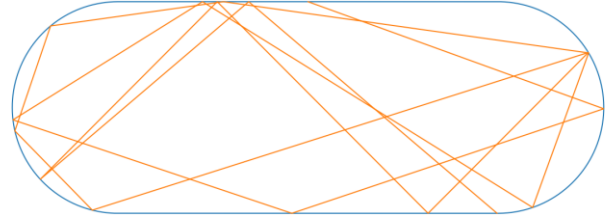


Fig.1. Trayectoria de una partícula moviéndose dentro de la curva cerrada con forma de estadio. El movimiento se origina en la parte central superior de la frontera siguiendo una trayectoria rectilínea hasta chocar de forma elástica con la barrera.

su dominio. La ecuación de Schrödinger se reduce a la ecuación de Helmholtz estacionaria $\Delta\psi(\mathbf{q}) + k^2\psi(\mathbf{q}) = 0$ con condiciones de contorno, sus soluciones dan la probabilidad de que una partícula se encuentre en una región específica del dominio. Este problema se encuentra en gran variedad de sistemas físicos tanto clásicos (ondas en fluidos y sonido, luz y microondas) como modernos (cavidades de microondas, compuertas, tablas mesoscópicas GaAs, trampas de átomos ultrafríos, entre otros sistemas) con diferentes comportamientos de interés como las cicatrices [3] y los vórtices [7].

En este trabajo proponemos el uso de la descomposición en modos dinámicos [4] para el estudio de billares clásicos y mostramos un método numérico (integral de frontera [5]) introductorio usado en el estudio del caos cuántico.

II. METODOLOGÍA

Los billares son sistemas en los que una partícula se encuentran confinada por una frontera a una región específica del espacio. Un ejemplo clásico consiste de una partícula rebotando entre paredes rígidas (Fig. 1), por lo que dentro del billar esta se mueve como una partícula libre y cuando choca con las paredes sigue la ley de Snell. Dependiendo de las condiciones de frontera el sistema puede ser integrable, semi-

integrable o caótico, y es estudiado tanto en el espacio de fase como en el de configuraciones [2].

A. Billares Clásicos

El movimiento dentro de un billar clásico está compuesto por trayectorias rectas interrumpidas por las paredes del billar, por lo que en el espacio de configuraciones las trayectorias son líneas que unen los diferentes puntos de choque, como se muestra en la figura 1, por lo que el problema se reduce a encontrar los puntos de choque sobre la frontera y el ángulo de reflexión, que es equivalente a encontrar la dirección de la velocidad de la partícula. En el espacio de fase se define una sección de Poincaré [10] [17] definida por la longitud de arco a lo largo de la frontera y la proyección de la velocidad en el vector tangente a la frontera inmediatamente después de un choque [2]. El comportamiento del sistema estará totalmente definido por la forma del billar, por lo que puede ser completamente integrable, como en el caso del billar con forma rectangular o de elipse, o caótico para los casos de Sinai, cardioides o estadios.

Los sistemas dinámicos no lineales caóticos son de especial interés porque están presentes en la mayoría de los sistemas reales. Koopman [12] mostró en 1931 que los sistemas no lineales pueden pasarse a espacios lineales de dimensión infinita, lo que ha motivado la búsqueda de aproximaciones numéricas finitas de estos espacios [4]. En la siguiente sección se muestra brevemente en que consiste la descomposición en modos dinámicos (DMD) como un método basado en el uso de datos encaminado hacia búsqueda de las funciones de Koopman que linealizan un sistema no lineal.

B. Descomposición en Modos Dinámicos (DMD)

El método DMD [8] realiza una descomposición espacio-temporal (de forma local) de datos organizados temporalmente en un conjunto de modos dinámicos. El método combina técnicas de reducción de dimensionalidad, con transformaciones de Fourier en el tiempo, relacionando modos espaciales con frecuencias temporales y tasas de crecimiento o decrecimiento.

Dado un sistema dinámico de la forma:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t; \mu), \quad (1)$$

donde $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ es un vector que contienen el estado del sistema en un tiempo t , μ los parámetros del sistema y la función vectorial \mathbf{f} representa la dinámica, la cual generalmente es no lineal. Para tiempos discretos se tienen que

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_k). \quad (2)$$

La ecuación lineal de la forma:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathcal{A}\mathbf{x} \quad (3)$$

tienen solución

$$\mathbf{x}(t) = \sum_{k=1}^n \phi_k \exp(\omega_k t) b_k = \Phi \exp(\Omega t) \mathbf{b}, \quad (4)$$

donde ϕ_k y ω_k son vectores y valores propios de la matriz \mathcal{A} y el vector \mathbf{b} está compuesto por los coeficientes b_k de las coordenadas de $\mathbf{x}(0)$ en la base de valores propios.

Dada una dinámica continua como en la ecuación (3) es posible tener un sistema discreto con saltos de tiempo Δt de la forma:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{A}\mathbf{x}_k, \quad (5)$$

donde

$$\mathbf{A} = \exp(\mathcal{A}\Delta t). \quad (6)$$

La solución a la ecuación (5) también puede expresarse en términos de los valores λ_k y vectores ϕ_k propios de \mathbf{A} :

$$\mathbf{x}_k = \sum_{j=1}^r \phi_j \lambda_j^k b_j = \Phi \Lambda^k \mathbf{b}. \quad (7)$$

En donde nuevamente \mathbf{b} contienen a los coeficientes de las condiciones iniciales \mathbf{x}_0 en la base de vectores propios tal que $\mathbf{x}_0 = \Phi \mathbf{b}$. La cantidad r hace referencia a la reducción de dimensionalidad ($r < m$).

El objetivo de DMD es encontrar una descomposición propia de menor rango (r) que (4) el de la matriz \mathbf{A} , que mejor se ajusta a la trayectoria \mathbf{X}_k (para valores de $k = 1, 2, \dots, m$) en términos de la regresión en mínimos cuadrados

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{A}\mathbf{x}_k\|_2 \quad (8)$$

que minimiza sobre los puntos $k = 1, 2, \dots, m-1$. Para realizar esta optimización sobre un conjunto dado de estados se definen las siguientes matrices:

$$\mathbf{X} = [\mathbf{x}_0 \quad \mathbf{x}_1 \quad \dots \quad \mathbf{x}_{m-1}], \quad (9)$$

$$\mathbf{X}' = [\mathbf{x}_1 \quad \mathbf{x}_2 \quad \dots \quad \mathbf{x}_m], \quad (10)$$

en donde \mathbf{x}_k es un vector columna, por lo que el tamaño de la matriz \mathbf{X} es $n \times m$. Para sistemas no lineales se quiere encontrar una aproximación lineal de la forma:

$$\mathbf{X}' \approx \mathbf{A}\mathbf{X}. \quad (11)$$

La aproximación que ajusta mejor los datos está dada por:

$$\mathbf{A} = \mathbf{X}'\mathbf{X}^\dagger, \quad (12)$$

en donde \dagger es el operador pseudoinverso de Moore-Penrose. La solución (12) minimiza el error en

$$\|\mathbf{X}' - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F, \quad (13)$$

donde $\|\cdot\|_F$ es la norma de Frobenius, la cual está dada por:

$$\|\mathbf{X}\|_F = \sqrt{\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^m X_{jk}^2}. \quad (14)$$

Para el uso de este método se asume que el tamaño de los estados \mathbf{x}_k es muy grande en comparación con el número de estados ($n \gg m$).

III. Resultados

A. Algoritmo DMD

El algoritmo para obtener la DMD se resume en los siguientes cuatro pasos [4], [8]:

- Realizar una descomposición en valores singulares (SVD) [16][4] de \mathbf{X} (9):

$$\mathbf{X} \approx \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^* \quad (15)$$

en donde $*$ es el transpuesto conjugado, $\mathbf{S} \in \mathbb{C}^{r \times r}$ una matriz diagonal que contiene los valores singulares de \mathbf{X} , $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{n \times r}$ y $\mathbf{V} \in \mathbb{C}^{m \times r}$ matrices unitarias, con $r \leq m$ el rango reducido de la SVD de \mathbf{X} .

- Con los resultados obtenidos se calcula el pseudoinverso de \mathbf{X} , con lo que la matriz \mathbf{A} toma la forma y su versión reducida $\tilde{\mathbf{A}}$:

$$\mathbf{A} = \mathbf{X}'\mathbf{V}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{U}^*. \quad (16)$$

Computacionalmente hablando es mejor calcular la proyección de tamaño $r \times r$ de la matriz \mathbf{A} en los modos POD (Descomposición ortogonal propia [4]):

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}^*\mathbf{A}\mathbf{U} = \mathbf{U}^*\mathbf{X}'\mathbf{V}\mathbf{S}^{-1}. \quad (17)$$

- Se encuentra la descomposición espectral de $\tilde{\mathbf{A}}$:

$$\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{W} = \mathbf{W}\mathbf{\Lambda}, \quad (18)$$

donde las columnas de \mathbf{W} son los vectores propios y la diagonal de la matriz $\mathbf{\Lambda}$ contienen los valores propios λ_k .

- Se calcula la matriz de modos Φ usando los vectores propios de la matriz $\tilde{\mathbf{A}}$, esto es:

$$\Phi = \mathbf{X}'\mathbf{V}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{W}. \quad (19)$$

B. Aplicación de DMD a Billares Clásicos

Las posibles trayectorias que podría seguir una partícula libre dentro de un billar pueden ser aproximadas de manera local espacial y temporalmente usando la descomposición en modos dinámicos (DMD). Como ejemplo tomaremos un billar con forma de estadio como el que se muestra en la figura 2, para el cual consideraremos cinco mil trayectorias partiendo de un mismo punto elegido de forma aleatoria en direcciones también aleatorias con magnitud uno, cada una de las trayectorias es independiente y corresponden a una única partícula moviéndose dentro de la frontera. Se construye una matriz \mathbf{X} compuesta por los vectores \mathbf{x}_k que contienen las posiciones de las trayectorias a un tiempo $t_k = k\Delta t$ con $\Delta t = 0.1$, hasta un $t_m = 50$ ($m = 500$). En la siguiente figura mostramos los resultados para una de las trayectorias analizadas con DMD, en la parte de arriba se muestra la trayectoria construida juntando los puntos de choque sobre la frontera, en la de en medio la trayectoria formada por las posiciones de la partícula en intervalos de tiempo Δt , y en la

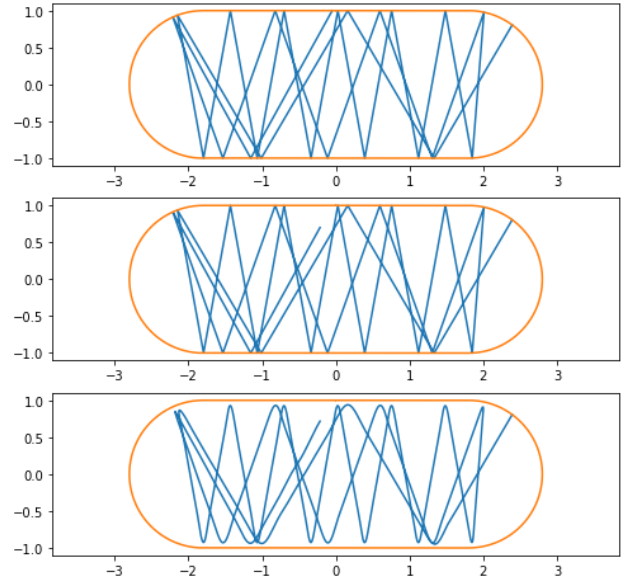


Fig. 2. Ejemplo de DMD para un billar con forma de estadio. La trayectoria inicia

parte baja la trayectoria reconstruida a partir de los modos dinámicos, las frecuencias y las tasas de crecimiento o decrecimiento presentes en (7).

Aunque el ejemplo muestre que es posible descomponer las diferentes trayectorias en modos dinámicos, para obtener ajustes más precisos es necesario tomar valores de r grandes, por lo que el análisis de los patrones presentes en los modos dinámicos se hace más difícil. A pesar de esto pensamos que

el método basado en datos (provenientes de experimentos o simulaciones) puede servir como una herramienta computacional para el análisis de billares clásicos.

C. Billares Cuánticos

El análogo cuántico a los billares clásicos son los pozos de potencial bidimensionales o billares cuánticos. El problema consiste en la solución a la ecuación de Schrödinger estacionaria para una partícula dentro de un pozo de potencial, esto es:

$$\Delta\psi_j \equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi_j = -k_j^2 \psi_j, \quad (20)$$

con condiciones de contorno de Dirichlet

$$\psi(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega \quad (21)$$

Esta ecuación de onda independiente del tiempo es la ecuación de Helmholtz usada en el estudio de ondas de sonido, placas vibrantes, microondas, entre otros sistemas, que permiten realizar estudios experimentales que ayudan a comprobar predicciones de la teoría de billares cuánticos.

D. Discontinuidades de la Función de Green

Las distribuciones de capa simple y doble con densidades μ para la solución fundamental (función de Green) a la ecuación de Helmholtz está definidas respectivamente como [11][15][6]:

$$(S\mu)(q) = \oint_{\delta\Omega} \mu(q') G(q, q') ds', \quad (22)$$

$$(D\mu)(q) = \oint_{\delta\Omega} \mu(q') \frac{\partial G(q, q')}{\partial n'} ds', \quad (23)$$

tienen diferentes comportamientos cerca de la frontera. La distribución simple es continua para cualquier valor de $q \in \mathbb{R}^2$, pero su derivada normal tienen un salto en el contorno;

$$\frac{\partial(S\mu)(q)}{\partial n} = \begin{cases} \frac{1}{2}\mu(q) + \frac{\partial(S\mu)(q)}{\partial n} & \text{desde } q \in \mathbb{R}^2 \setminus \Omega \\ -\frac{1}{2}\mu(q) + \frac{\partial(S\mu)(q)}{\partial n} & \text{desde } q \in \Omega \setminus \delta\Omega \end{cases} \quad (24)$$

cuando $q \rightarrow \delta\Omega$ por el exterior y el interior de Ω . Para el caso de capa doble se tiene la siguiente discontinuidad:

$$\lim_{q \rightarrow \delta\Omega} (D\mu)(q) = \begin{cases} \frac{1}{2}\nu(q) + \oint_{\delta\Omega} \nu(q) \frac{\partial G(q, q')}{\partial n'} ds' & \text{para } q \in \mathbb{R}^2 \setminus \Omega \\ -\frac{1}{2}\nu(q) + \oint_{\delta\Omega} \nu(q) \frac{\partial G(q, q')}{\partial n'} ds' & \text{para } q \in \Omega \end{cases} \quad (25)$$

nuevamente q se acerca tanto desde el exterior y el interior de Ω . Nótese que se tienen dos derivadas normales, una para el vector normal en el punto $q(n)$ y otra para el punto $q'(n')$.

La derivada normal de la distribución de la capa doble es continua para ν continua en $\delta\Omega$.

Las relaciones (24) y (25) se mantienen tanto para capas simples o dobles en el caso tridimensional.

E. Método de Integral de Frontera

El método de integral de frontera (Boundary integral method) [14][5] consiste en reducir la ecuación de Helmholtz bidimensional a una ecuación integral en una dimensión.

De la ecuación inhomogénea para la función de Green $G(\mathbf{q} = (x, y), \mathbf{q}' = (x, y'))$ para $\mathbf{q}' \in \delta\Omega$, está dada por:

$$(\Delta + E_k)G_k(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = (\Delta + k^2)G_k(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), \quad (26)$$

cuya solución está dada por:

$$G_k(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = -\frac{i}{4}H_0^{(1)}(k|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) = -\frac{i}{4}[J_0(k|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) + iY_0(k|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|)], \quad (27)$$

donde $H_0^{(1)}$ es la función de Hankel de primera especie.

Integrando sobre el área Ω la diferencia del producto de ψ con la ecuación (20) y G_k con (26), se obtiene:

$$\int_{\Omega} [\psi(\mathbf{q}') \Delta' G_k(\mathbf{q}, \mathbf{q}') - G_k(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \Delta' \psi(\mathbf{q}')] d^2 \mathbf{q}' = \int_{\Omega} \psi(\mathbf{q}') \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') d^2 \mathbf{q}'. \quad (28)$$

Aplicando la segunda identidad de Green

$$\oint_{\delta\Omega} \left[\psi(\mathbf{q}') \frac{\partial G_k(\mathbf{q}, \mathbf{q}')}{\partial n'} - G_k(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \frac{\partial \psi(\mathbf{q}')}{\partial n'} \right] ds' = \begin{cases} \psi(\mathbf{q}) & \text{para } \mathbf{q} \in \Omega \setminus \partial\Omega \\ \frac{1}{2}\psi(\mathbf{q}) & \text{para } \mathbf{q} \in \partial\Omega \\ 0 & \text{demás casos.} \end{cases} \quad (29)$$

Donde la derivada normal está definida como

$$\frac{\partial}{\partial n'} = \mathbf{n}(s') \nabla$$

para el vector normal $\mathbf{n}(s) = (y'(s), -x'(s))$ hacia afuera de Ω . La frontera es parametrizada en términos de la longitud s en dirección de las manecillas del reloj. El factor $1/2$ en (29) se debe a la discontinuidad de la función de Green en la frontera [11] y dependiendo de su forma este factor puede cambiar, pero no es de importancia para la condición de Dirichlet $\psi(\mathbf{q}') = 0$, para las cuales se tiene que:

$$\oint_{\delta\Omega} u(s') G_k(\mathbf{q}, \mathbf{q}') ds' = 0, \quad \mathbf{q} \in \partial\Omega, \quad (30)$$

donde

$$u(s) := \frac{\partial}{\partial n} \psi(\mathbf{q}(s)) := \mathbf{n}(s) \nabla \psi(\mathbf{q}(s)) := \mathbf{n}(s) \lim_{\substack{\mathbf{q}' \rightarrow \mathbf{q}(s) \\ \mathbf{q}' \in \Omega \setminus \delta\Omega}} \nabla \psi(\mathbf{q}') \quad (31)$$

es la derivada normal de la función ψ .

Para evitar las divergencias de la función de Hankel en el origen derivada la ecuación (29), teniendo en cuenta que las derivadas de la forma $\frac{\partial \psi(q')}{\partial n'}$ se anulan, la condición de Dirichlet y la discontinuidad en el contorno de la capa doble, se tienen que:

$$u(s) = -2 \oint_{\delta\Omega} \frac{\partial G_k(\mathbf{q}, \mathbf{q}')}{\partial n} u(s') ds', \quad \mathbf{q} \in \partial\Omega. \quad (32)$$

La derivada la función de Green (26) es de la forma:

$$\frac{\partial G_k}{\partial n} = \frac{ik}{4} \cos(\phi(s, s')) H_1^{(1)}(k\tau(s, s')), \quad (33)$$

en donde

$$\cos \phi(s, s) = \frac{\mathbf{n}(s)(\mathbf{q}(s) - \mathbf{q}(s'))}{\tau(s, s')} \quad (34)$$

con $\tau(s, s')$ la distancia Euclidiana entre dos puntos de la frontera. Se tienen entonces la ecuación integral para la derivada normal:

$$u(s) = \oint_{\delta\Omega} Q_k(s, s') u(s') ds', \quad (35)$$

con el núcleo:

$$Q_k(s, s') = -\frac{ik}{2} \cos(\phi(s, s')) H_1^{(1)}(k\tau(s, s')). \quad (36)$$

La ecuación (35) es una ecuación de Fredholm de segundo tipo, la cual tiene soluciones no triviales si el determinante $D(k) := \det(\mathbb{I} - \hat{Q}_k)$ es cero, con

$$\hat{Q}_k(u(s)) = \oint_{\delta\Omega} Q_k(s, s') u(s') ds', \quad (37)$$

un operador integral sobre el contorno $\delta\Omega$.

Se tiene que para $k = \sqrt{E_n}$, $D(k) = 0$ [5], en donde E_n es un valor propio de la ecuación de Helmholtz con condiciones de contorno de Dirichlet. La función de Hankel $H_1^{(1)}(x)$ y $\cos \phi(s - s')$ para puntos cercanos en la frontera están dadas por:

$$H_1^{(1)}(k\tau(s, s')) \approx -\frac{2i}{\pi k |s - s'|} \cos \phi(s, s') \approx -\frac{1}{2} \kappa |s - s'|. \quad (38)$$

para $s - s' \rightarrow 0$. El término $\kappa(s)$ es la curvatura del contorno en el punto s , definida como $\kappa(s) = q_1'(s)q_2''(s) - q_2'(s)q_1''(s)$, de tal forma que para las rectas $\kappa(s_{recta}) = 0$ y para un círculo de radio uno $\kappa(s_{círculo}) = 1$. Por lo tanto, se obtiene que:

$$Q_k(s, s') \rightarrow \frac{1}{2\pi} \kappa(s), \quad \text{para } s - s' \rightarrow 0. \quad (39)$$

F. Desimetrización

La función de Green para un sistema con simetrías se puede obtener como la suma de los elementos en los que se divide la frontera ante reflexiones. Por ejemplo, para sistemas simétricos con respecto al eje q_1 se tienen que:

$$G_k^\pm(\mathbf{q}, \mathbf{q}') := G_k(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) \pm G_k(|\mathbf{q} - (q_1', -q_2')|),$$

donde el signo $+$ o $-$ corresponde con la simetría par o impar de la función, la cual depende de las condiciones de contorno, par ($+$) para condiciones de Neumann e impar ($-$) para condiciones de Dirichlet.

Para el caso de un billar con forma de estadio (fig. 2.) las condiciones de contorno en los ejes de simetría establecen cuatro tipos de funciones de Green, de la forma [14][5]:

$$\begin{aligned} G_k^{DD(-)}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') &:= G_k(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) - G_k(|\mathbf{q} - (q_1', -q_2')|) + G_k(|\mathbf{q} - (-q_1', -q_2')|) - G_k(|\mathbf{q} - (-q_1', q_2')|), \\ G_k^{DN(+)}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') &:= G_k(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) + G_k(|\mathbf{q} - (q_1', -q_2')|) - G_k(|\mathbf{q} - (-q_1', -q_2')|) - G_k(|\mathbf{q} - (-q_1', q_2')|), \\ G_k^{ND(+)}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') &:= G_k(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) - G_k(|\mathbf{q} - (q_1', -q_2')|) - G_k(|\mathbf{q} - (-q_1', -q_2')|) + G_k(|\mathbf{q} - (-q_1', q_2')|), \\ G_k^{NN(+)}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') &:= G_k(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) + G_k(|\mathbf{q} - (q_1', -q_2')|) + G_k(|\mathbf{q} - (-q_1', -q_2')|) + G_k(|\mathbf{q} - (-q_1', q_2')|). \end{aligned} \quad (40, 41, 42, 43)$$

De esta forma los valores y funciones propias quedan separadas en diferentes clases de simetrías y podemos realizar los cálculos solo sobre un cuarto de la frontera.

IV. DISCUSIÓN

A. Valores Propios

La ecuación integral para la derivada normal (35) se puede discretizar a lo largo de la frontera para obtener una suma de Riemann de la forma:

$$u(s_i) = \Delta s \sum_{j=0}^{N-1} Q_k(s_i, s_j) u(s_j), \quad (44)$$

donde $s_i = (i + 1/2)\Delta s$ para $i = 0, 1, \dots, N - 1$, con $\Delta s = L/N$, L la longitud de la frontera o contorno y N el número de piezas en las que se dividirá la frontera. La ecuación (44) se puede escribir en términos matriciales como:

$$A_k \mathbf{u} = 0, \quad \text{con } A_{ij} = \delta_{ij} - \Delta s Q_k(s_i, s_j). \quad (45)$$

Se tiene entonces que para $s_i = s_j$ el núcleo o kernel se reduce a (39). La solución a la ecuación (45) da una aproximación a los valores propios k_n^2 y los vectores propios

u_n . Entonces el problema de encontrar los valores propios de energía para la ecuación de Schrödinger se reduce a encontrar las raíces reales del determinante

$$\det(A_k) = 0 \quad (46)$$

como función de $k = \sqrt{E}$, donde A_k es una matriz compleja no Hermítica y densa. Por lo tanto, para encontrar los valores propios de energía se deben encontrar los valores de k para los cuales el determinante (46) se acerque a cero, pero es más útil encontrar la descomposición en valores singulares (SVD, singular value decomposition)

$$A = USV^* \quad (47)$$

La matriz S es una matriz diagonal que contiene los valores singulares de la matriz A , U es una matriz unitaria cuyas columnas contienen los vectores propios de A y V otra matriz unitaria cuyas columnas componen el espacio nulo de A que contienen los vectores \mathbf{u}_k que serán usados para encontrar la funciones propias de la ecuación de Helmholtz (sec. J). La razón por la cual es más útil calcular SVD en lugar del determinante $\det(A_k)$ es que SVD tiene mayor información que el determinante, ya que, los estados degenerados pueden ser observados cuando el segundo menor valor singular SV_2 se acerca junto con SV_1 a cero. Es importante mencionar que estas degeneraciones también pueden verse al analizar la parte imaginaria y la parte real de $\det(A_k)$ [5], pero esto exige mayor costo computacional al requerir una discretización más fina.

En la figura 3 se muestran las gráficas correspondientes a los tres valores singulares menores obtenidos para el estadio con condiciones de Dirichlet sobre el primer cuarto del contorno y para los diferentes tipos de simetrías con $a = 1.8$, $r = 1$ y $N = 250$

Respecto a los ejes $q_1 = x$ y $q_2 = y$ en el intervalo de energía $E = k^2 \in [1, 120]$. Los resultados se obtuvieron utilizando el lenguaje python y la librería numpy, la cual utiliza el paquete LAPACK con la rutina `_gesdd`.

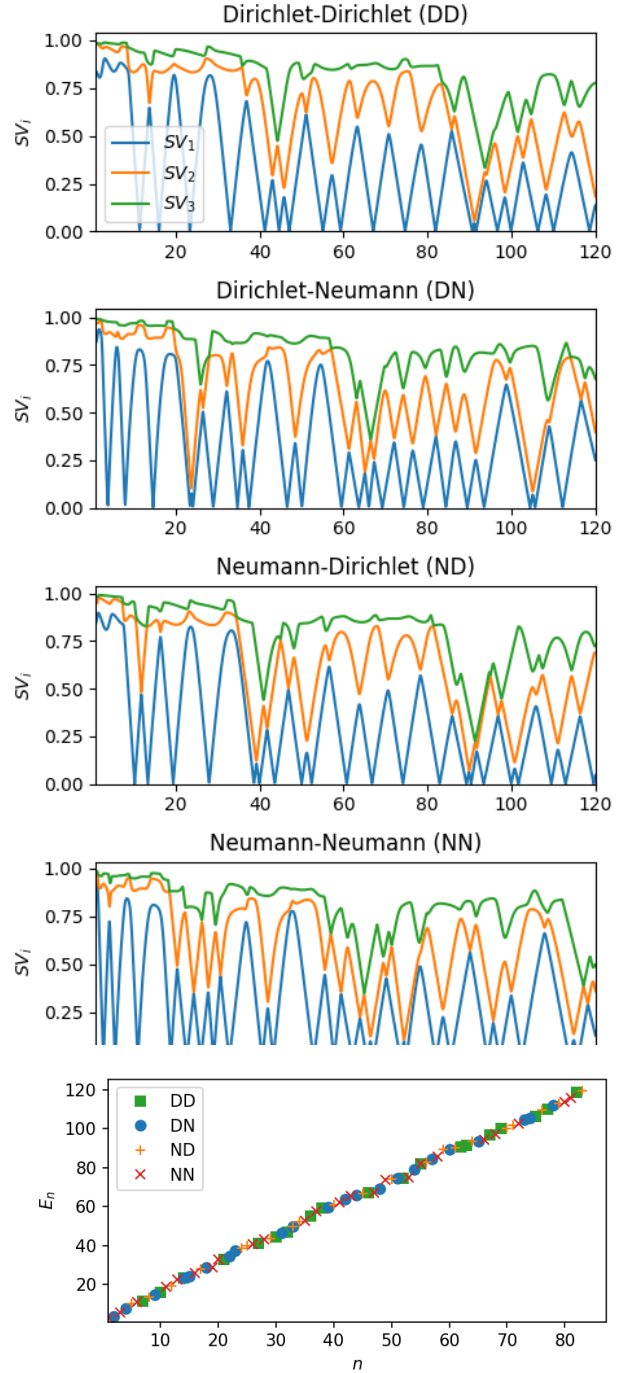


Fig. 3. Valores singulares para las diferentes clases de simetrías axiales. Los valores que se aproximan a cero corresponden a las diferentes energías propias de la ecuación de Helmholtz. En este ejemplo se tomó para la parte recta del estadio $a=1.8$, un radio $r=1$ en la sección circular y una división del primer cuarto en partes.

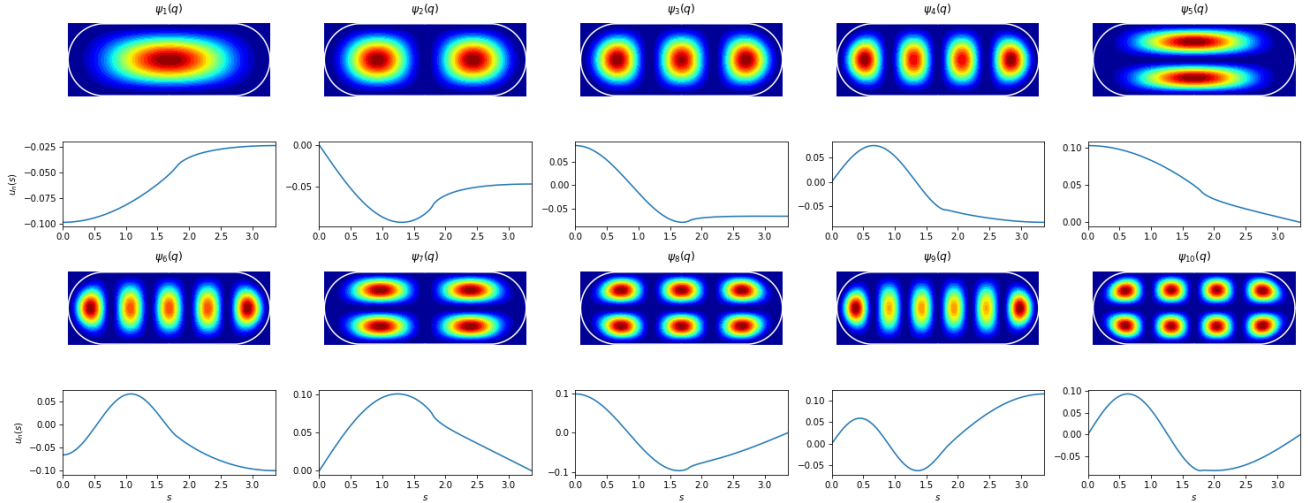


Fig. 4. Norma al cuadrado de las funciones de onda para los diez primeros estados de energía. En la parte de abajo se muestran las respectivas derivadas normales en el primer cuarto del estadio.

B. Funciones Propias

Las funciones propias pueden ser calculadas usando los vectores propios $u(s)$, se tienen que:

$$\psi(\mathbf{q}) = -\frac{i}{4} \oint_{\delta\Omega} H_0^{(1)}(k|\mathbf{q} - \mathbf{q}(s)|)u(s)ds, \quad \text{para } \mathbf{q} \in \Omega \setminus \delta\Omega. \quad (48)$$

Teniendo en cuenta que:

$$\oint_{\delta\Omega} J_0(k|\mathbf{q} - \mathbf{q}(s)|)u(s)ds = 0,$$

puesto que la función J_0 en $G_k(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ es una solución homogénea a la ecuación (26). Entonces la función de onda queda:

$$\psi(\mathbf{q}) = -\frac{1}{4} \oint_{\delta\Omega} Y_0(k|\mathbf{q} - \mathbf{q}(s)|)u(s)ds, \quad \text{para } \mathbf{q} \in \Omega \setminus \delta\Omega. \quad (49)$$

En la figura 4 se muestran las derivadas normales y las funciones de onda para los primeros niveles de energía, las cuales muestran similitudes con las soluciones para un billar rectangular bidimensional [18], ya que pequeñas deformaciones en el contorno generan deformaciones leves de la función de onda.

IV. CONCLUSIONES

Los billares presentan diferentes tipos de integrabilidad, nos interesan en especial aquellos que presentan un comportamiento caótico como en el caso del billar con forma de estadio, el cual es altamente sensible a cambios pequeños en las condiciones iniciales. El modelo DMD muestra que

trayectorias en billares caóticos clásicos, pueden ser descompuestas mediante un modelo de linealización en modos dinámicos, lo que sugiere que es posible encontrar un conjunto de funciones de Koopman que linealicen el sistema.

Para el caso cuántico aplicamos el método de integral de frontera nuevamente a un estadio, esta herramienta ayuda a encontrar las energías propias y sus correspondientes funciones de onda, las cuales tienen especial importancia, ya que, permite identificar las líneas y regiones nodales [9] dentro del dominio, lo que podría dar cuenta de la integrabilidad del sistema clásico. Resaltamos la característica lineal de la ecuación de Schrödinger y de Helmholtz, razón por la cual no se tienen un comportamiento caótico.

Lo anterior nos empuja a la siguiente pregunta: ¿Existe alguna relación entre las aproximaciones lineales de sistemas clásicos caóticos (o no lineales) y el sistema cuántico análogo?

REFERENCIAS

- [1] Berry, M. (1989). Quantum chaology, not quantum chaos. 40.
- [2] Berry, M. V. (1981). Regularity and chaos in classical mechanics, illustrated by three deformations of a circular 'billiard'. European Journal of Physics, 2(2):91–102.
- [3] Bogomolny, E. and Schmit, C. (2004). Structure of wave functions of pseudo-integrable billiards. Phys. Rev. Lett., 92:244102.
- [4] Brunton, S. L. and Kutz, J. N. (2019). Data-Driven Science and Engineering: Machine Learning, Dynamical Systems, and Control. Cambridge University Press, Great Britain, 1 edition.
- [5] Bäcker, A. (2002). Numerical aspects of eigenvalue and eigenfunction computations for chaotic quantum systems.
- [6] Colton D., K. R. (2013). Integral Equation Methods in Scattering Theory. Classics in Applied Mathematics vol.72. SIAM.
- [7] Dirac, P. A. M. (1931). Quantised singularities in the electromagnetic field., Proc. Roy. Soc. Lond. A, 133(821):60–72.

- [8] J. Nathan Kutz, Steven L. Brunton, B. W. B. J. L. P. (2016). *Dynamic Mode Decomposition: Data-Driven Modeling of Complex Systems*. SIAM-Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [9] Jain, S. R. and Samajdar, R. (2017). Nodal portraits of quantum billiards: Domains, lines, and statistics. *Reviews of Modern Physics*, 89(4).
- [10] Jorge V. José, E. J. S. (1998). *Classical dynamics. A contemporary approach*. Cambridge University Press.
- [11] Kleinman, R. E. and Roach, G. F. (1974). Boundary integral equations for the three-dimensional helmholtz equation. *SIAM Review*, 16(2):214–236.
- [12] Koopman, B. O. (1931). Hamiltonian systems and transformation in hilbert space. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 17(5):315–318.
- [13] Rozikov, U. A. (2019). *An Introduction to Mathematical Billiards*. World Scientific Publishing Company.
- [14] Sieber, M. and Steiner, F. (1990). Quantum chaos in the hyperbola billiard. *Physics Letters A*, 148(8):415–420.
- [15] Smirnov, V. I. and (Auth.), A. J. L. (1964). *A Course of Higher Mathematics. Volume IV*. Elsevier Ltd.
- [16] Strang, G. (2016). *Introduction to Linear Algebra*. Wellesley-Cambridge Press, 5th edition.
- [17] Tabor, M. (1989). *Chaos and integrability in nonlinear dynamics*. Wiley-Interscience, 1 edition.
- [18] Alan Hinchliffe (2008). *Molecular modelling for beginners*. Pag- 158. Wiley. 2 edition.