



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES

INTERPRETACIÓN ESTADÍSTICA DE LAS MÉTRICAS
GEOMETROTERMODINÁMICAS

T E S I S

MAESTRIA EN CIENCIAS FÍSICAS
QUE PARA OPTAR EL GRADO DE:

PRESENTA:

EDGAR ANTONIO VALDÉS PORRAS

TUTOR:

DR. HERNANDO QUEVEDO CUBILLOS
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES

COMITÉ TUTOR:

DR. ERIK LEONARDO PATIÑO JAIDAR
FACULTAD DE CIENCIAS

DR. DAVID PHILIP SANDERS
FACULTAD DE CIENCIAS

CIUDAD DE MÉXICO

MAYO, 2016



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**Interpretación Estadística de las métricas
Geometrotermodinámicas**

por

Edgar Antonio Valdés Porras

Licenciado en Física, UNAM (2012)

Tesis presentada para obtener el grado de

Maestría en Ciencias Físicas

en el

INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Ciudad de México. Mayo, 2016

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Sobre la GTD	1
1.2. Sobre las métricas de la GTD	2
1.3. Sobre los contactomorfismos	2
1.4. Sobre la interpretación estadística de la estructura geométrica de la termodinámica	3
1.5. Sobre esta tesis	3
1.6. Sobre la estructura de esta tesis	4
2. Geometrotermodinámica	5
2.1. El espacio fase termodinámico	6
2.1.1. El TPS como variedad de contacto	6
2.1.2. Las transformaciones de Legendre como generadores de métricas para el TPS	6
2.1.3. El TPS como variedad de Riemann	7
2.2. El espacio de estados de equilibrio	8
2.2.1. El sentido físico del TES	8
2.2.2. El TES como variedad de Riemann	9
2.3. Referencias	10
3. Métricas de la Geometrotermodinámica	11
3.1. Métrica generalizada de la GTD	12
3.2. Cómo encontrar métricas invariantes de Legendre	12
3.3. Referencias	14

4. Contactomorfismos	15
4.1. La noción de contacto y el principio de Huygens	16
4.2. Definiciones de objetos de contacto	17
4.2.1. Variedad de contacto	17
4.2.2. Contactomorfismo	18
4.3. Condición de integrabilidad de F para χ	18
4.3.1. Demostración de la condición de integrabilidad para χ	19
5. Interpretación estadística de las métricas geometrotermodinámicas	25
5.1. Teoría de fluctuaciones Gaussiana	26
5.2. Ecuaciones del difeomorfismo χ	27
5.2.1. Calculo de las ecuaciones del difeomorfismo χ	28
5.3. Soluciones lineales	29
5.4. Soluciones más generales aplicables a las métricas de la GTD	30
5.4.1. Clasificación de las soluciones generales	31
5.4.2. Como encontrar difeomorfismos utilizando la solución general	32
5.4.3. Como generar una solución para G^{III}	32
5.5. Difeomorfismo χ con $X^a = X^a(E^a)$ y $Y^a = Y^a(I^a)$	34
5.5.1. Reducción de la condición de integrabilidad y las ecuaciones del difeomorfismo para χ con $X^a = X^a(E^a)$ y $Y^a = Y^a(I^a)$	35
5.5.2. Aplicación a la métrica G^{III}	36
6. Conclusiones	39
A. Propiedades Geométricas del TPS	42
A.1. Objetos de la métrica G^{III}	43
A.1.1. Componentes de la métrica G^{III}	43
A.1.2. Ecuaciones geodésicas de la métrica G^{III}	44
A.1.3. Simbolos de Christoffel para la metrica G^{III}	45
A.1.4. Tensor de Ricci para la métrica G^{III}	45
A.1.5. Escalar de Ricci para la métrica G^{III}	46

A.1.6. Tensor de Einstein para la métrica G^{III}	46
A.2. Objetos de la métrica G^I	47
A.2.1. Componentes de la métrica G^I	47
A.2.2. Ecuaciones geodésicas de la métrica G^I	48
A.2.3. Simbolos de Christoffel para la métrica G^I	48
A.2.4. Tensor de Ricci para la métrica G^I	48
A.2.5. Escalar de Ricci para la métrica G^I	49
A.2.6. Tensor de Einstein para la métrica G^{III}	49
A.3. Objetos de la métrica G^{II}	50
A.3.1. Componentes de la métrica G^{II}	50
A.3.2. Ecuaciones geodésicas de la métrica G^{III}	51
A.3.3. Simbolos de Christoffel para la métrica G^{III}	51
A.3.4. Tensor de Ricci para la métrica G^{III}	52
A.3.5. Escalar de Ricci para la métrica G^{III}	53
A.3.6. Tensor de Einstein para la métrica G^{III}	53
B. Desarrollo de software	54
B.1. Alto nivel y bajo nivel en los lenguajes de programación	54
B.2. Problema computacional en esta tesis	55
B.3. Diagrama de solución y documentación	56
Bibliografía	58

*Cuatro infames pusieron un ojo particular en mi.
Encandiló Ella de las mil y una noches.*

Agradecimientos

A los infames y a Ella

Capítulo 1

Introducción

Diversos fenómenos físicos pueden ser estudiados utilizando estructuras matemáticas y una fuerte intuición geométrica. Para estudiar la termodinámica desde un punto de vista geométrico debemos encontrar estructuras que mimeticen sus propiedades principales, esperando no solamente recuperar la información de la teoría clásica, sino también profundizar en el entendimiento de ella. Esta idea es la que motivó a escribir este trabajo.

1.1. Sobre la GTD

La **geometrotermodinámica (GTD)** es un programa teórico que busca estudiar los sistemas termodinámicos utilizando conceptos geométricos. La forma en la cual busca hacerlo es estudiando la estructura de contacto del **espacio fase termodinámico (TPS)**, relacionandolo con una estructura de Riemann a través de una métrica invariante ante transformaciones de Legendre. La representación de los espacios físicos es un encaje del espacio TPS. El espacio encajado es llamado **espacio de estados de equilibrio (TES)**. La estructura Riemanniana es transportada del TPS al TES garantizando la invarianza de Legendre. En el TES utilizamos la métrica Riemanniana inducida para calcular sus geodésicas termodinámicas; que son interpretadas como procesos cuasi-estáticos para un único proceso termodinámico. También son calculadas los objetos geométricos usuales: tensor de Riemann, tensor de Ricci, escalar de Ricci. Utilizando estos objetos estudiamos la interacción en los sistemas termodinámicos. Las singularidades no removibles son interpretadas como transiciones de fase.

1.2. Sobre las métricas de la GTD

En el TPS, la estructura Riemanniana es definida a partir de **las métricas de la GTD**

$$G = \Theta \otimes \Theta + \Lambda h_{ab} dE^a \otimes dI^b, \quad (1-1)$$

descritas en **las coordenadas de Darboux** $Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\}$ con $a \in \{1, \dots, n\}$.

La cualidad más importante que tienen es que *son las métricas más generales que preservan la estructura de contacto del TPS bajo una transformación de Legendre.*

Su primera parte está conformada por el producto tensorial de **la 1-forma de contacto** $\Theta = d\Phi - \delta_{ab} I^a dE^b$. Tienen un factor conforme conocido como **la función conforme** $\Lambda = \Lambda(\Phi, E^c, I^c)$ y a la matrix $h_{ab} = h_{ab}(E^c, I^c)$ cuyas propiedades clasifican a las métricas de la GTD como **métricas invariantes ante transformaciones totales de Legendre y métricas invariantes ante transformaciones totales y parciales.**

1.3. Sobre los contactomorfismos

Las transformaciones de contacto son difeomorfismos que preservan una forma de contacto.

En particular, las transformaciones de Legendre son contactomorfismos.

Al pedir que un difeomorfismo sea un contactomorfismo, las ecuaciones usuales del difeomorfismo pueden ser reducidas. Esta idea la aplicamos dentro de este trabajo para relacionar las métricas de la GTD con la métrica

$$\tilde{G} = \tilde{\Theta}^2 + \delta_{ab} dX^a dY^a, \quad (1-2)$$

descritas en las coordenadas $Z^{\tilde{A}} = \{F, X^a, Y^a\}$ con $a \in \{1, \dots, n\}$. Estas métricas están conformadas por la 1-forma $\tilde{\Theta} = f_0 dF - f_a Y_a dX^a$ en la que $f_{0,a} = f_{0,a}(F, X^a, Y^a)$ y $f_{0,a} \neq 0 \in C^\infty$.

En este trabajo encontramos **las condiciones de integrabilidad** para obtener F como función de las coordenadas de Darboux, $F = F(Z^A)$.

1.4. Sobre la interpretación estadística de la estructura geométrica de la termodinámica

La teoría de fluctuaciones Gaussiana relaciona una distribución de probabilidad de Gauss con el Hessiano $\frac{\partial S}{\partial E^a \partial E^b}$ de la entropía S . A partir del Hessiano $\frac{\partial F}{\partial X^a \partial X^b}$ nosotros afirmamos que para un potencial termodinámico F , la misma distribución Gaussiana puede ser aplicada con la presente substitución.

En concreto, demandamos que la función F pueda ser escrita en términos de las coordenadas de Darboux con un difeomorfismo $\chi : \{Z^A\} \longrightarrow \{Z^{\tilde{A}}\}$ que además sea un contactomorfismo que relacione las 1-formas $\tilde{\Theta}$ y Θ .

Las ecuaciones del difeomorfismo χ son calculadas como parte de esta tesis y la solución clasificada general de ellas es dada. A partir de dicha solución podemos encontrar las soluciones particulares para las métricas de la GTD al especificar la forma de la matriz h_{ab} y utilizar un algoritmo basado en el tipo de solución general.

1.5. Sobre esta tesis

El propósito central de esta tesis es responder a la siguiente pregunta: *¿cómo podemos relacionar las métricas de la GTD con distribuciones de probabilidad?*

La forma en la que lo hacemos es llevando las métricas de la GTD G , via el difeomorfismo/contactomorfismo χ , hacia una métrica \tilde{G} que al ser proyectada al TES tiene la característica de ser Hessiana; siendo este el punto de partida para utilizarla dentro de la aproximación Gaussiana de la teoría de fluctuaciones.

En esta tesis calculamos las ecuaciones completas del contactomorfismo. A partir de estas soluciones construimos un algoritmo general que puede ser aplicado a cualquiera de las métricas de la GTD; basado en la construcción de una solución general y la clasificación de la misma. El

ejemplo de aplicación directo es la métrica¹ G^{III} ; para la cual encontramos las relaciones

$$F = \frac{\Phi}{2k + 2} \quad (1-3)$$

$$X^a = \frac{(E^a)^{2k+2}}{2k + 2} \quad (1-4)$$

$$Y^a = \frac{(I^a)^{2k+2}}{2k + 2}. \quad (1-5)$$

Nuestro argumento de conclusion establece que las soluciones a diferentes métricas de la GTD permitirían calcular funciones $F = F(E^c, I^c)$ de manera explicita; permitiendo ser un punto de partida para realizar teoría de fluctuaciones Gaussiana al pedir que la función F sea un potencial termodinámico.

1.6. Sobre la estructura de esta tesis

El capítulo 2 habla sobre el programa de la GTD definiendo las estructuras matemáticas que utiliza, sus relaciones y las propiedades de las mismas. En el capítulo 3 presentamos un análisis de las métricas de la GTD y desmostramos su propiedad más importantes: ser las más generales y sencillas invariantes ante transformaciones de Legendre. El capítulo 4 define las variedades de contacto y los contactomorfismos entre ellas. Presentamos también en el capítulo 4 el primer cálculo importante de este trabajo: las condiciones de integrabilidad . El capítulo 5 recapitula la teoría de fluctuaciones Gaussianas y presenta el segundo cálculo fundamental de esta tesis: las ecuaciones completas del contactomorfismo. A partir de estas soluciones se contruye un algoritmo para encontrar los difeomorfismos aplicandolo como caso concreto a la métrica G^{III} .

¹La métrica G^{III} es la métrica más general que incorpora la 1-forma de Gibbs y es invariante ante transformaciones totales y parciales de Legendre.

Capítulo 2

Geometrotermodinámica

El uso de la geometría en termodinámica comienza con Gibbs al presentar la primera ley de la termodinámica como una forma diferencial (*Gibbs* [1871]); permitiéndole interpretar a los estados de equilibrio de un sistema termodinámico como una superficie. Más adelante Carathéodory formuló las leyes de la termodinámica de manera axiomática utilizando las formas de Pfaff (*Caratheodory* [1909]); tomando como guía el concepto de proceso adiabático.

En 1973, Hermann mostró que las leyes empíricas de los fenómenos termodinámicos podrían ser descritas de una forma matemática y concisa (*Hermann* [1973]); propuso un esquema de definición en un marco geométrico para la termodinámica clásica utilizando un espacio de fase termodinámico como una variedad de contacto. Estos mismos estudios fueron extendidos por Mrugala, quien demostró que la estructura de contacto puede ser obtenida de manera natural utilizando una distribución canónica de probabilidad (*Mrugala et al.* [1990]).

Casi al mismo tiempo (1975), una segunda estructura geométrica en la forma de una métrica Riemanniana en el espacio de estados termodinámicos fue introducida en la teoría por Weinhold (*Weinhold* [1975]); siendo esta métrica el Hessiano de la energía interna. En 1979, Ruppeiner utilizó una métrica distinta a la de Weinhold como el punto de partida para una nueva teoría de fluctuaciones termodinámicas (*Ruppeiner* [1979]); esta métrica esta dada por el Hessiano de la entropía. En 1983, Salamon y Berry mostraron la conexión entre la geometría y la disipación (*Salamonet al.* [2006]).

Un nuevo enfoque fue presentado por Quevedo, donde las transformaciones de Legendre son asociadas tanto a la estructura de contacto como a la métrica (*Quevedo* [2007]).

En este capítulo daremos las definiciones de las estructuras fundamentales de la GTD y como se relacionan entre ellas. En la primera sección definimos el espacio fase termodinámico como una variedad Riemanniana de contacto y explicamos la característica principal de las métricas utilizadas en él. La segunda parte describe formalmente el espacio de estados de equilibrio y las formas de obtener información termodinámica a través de su curvatura.

2.1. El espacio fase termodinámico

El espacio fase termodinámico (TPS) \mathcal{T} es una variedad diferencial de dimensión $2n+1$, que es representada con un conjunto de coordenadas $Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\}$ con $a \in \{1, \dots, n\}$. Le damos nombres especiales a estas coordenadas: **el potencial termodinámico** Φ , **las coordenadas extensivas** E^a y **las coordenadas intensivas** I^a .

2.1.1. El TPS como variedad de contacto

La primera estructura que se añade al TPS es una estructura de contacto, con lo cual lo transformamos en una **variedad de contacto**. La variedad de contacto está formada por el par (\mathcal{T}, Θ) siendo Θ la **1-forma fundamental de Gibbs** definida como

$$\Theta = d\Phi - \delta_{ab} I^a dE^b \quad (2-1)$$

de acuerdo al **teorema de Darboux**. La característica de esta estructura es llamada **la condición de máxima no integrabilidad**:

$$\Theta \wedge (d\Theta)^n \neq 0. \quad (2-2)$$

2.1.2. Las transformaciones de Legendre como generadores de métricas para el TPS

Las transformaciones de Legendre (LT) son contactomorfismos cuya cualidad es que dejan invariante a Θ ; esta propiedad la llamamos **la invarianza de Legendre**. Consideremos ahora **transformaciones parciales de Legendre (LPT)** entre coordenadas $\{Z^A\}$ y coordenadas

$\{\tilde{Z}^A\} = \{\tilde{\Phi}, \tilde{E}^a, \tilde{I}^a\}$. Estas son descritas como

$$\begin{aligned}
\Phi &= \tilde{\Phi} - \delta_{lk} \tilde{E}^k \tilde{I}^l, \\
E^i &= -\tilde{I}^i, \\
I^i &= \tilde{E}^i, \\
E^j &= \tilde{E}^j, \\
I^j &= \tilde{I}^j;
\end{aligned} \tag{2-3}$$

donde $i \cup j$ es una descomposición disjunta del conjunto de índices $\{1, \dots, n\}$ y $k, l = \{1, \dots, i\}$. Si $i = \{1, \dots, n\}$ la transformación es denominada **transformación total de Legendre (LTT)**.

2.1.3. El TPS como variedad de Riemann

La segunda estructura que le añadimos al TPS es una estructura de variedad de Riemann, que es definida por una métrica no degenerada G . **La métrica termodinámica** G es invariante ante transformaciones de Legendre, es decir

$$G_{AB} \rightarrow \tilde{G}_{AB} = \frac{\partial Z^C}{\partial \tilde{Z}^A} \frac{\partial Z^D}{\partial \tilde{Z}^B} G_{CD}, \tag{2-4}$$

donde $Z^A = Z^A(\tilde{Z}^A)$ es dado por (2-3). Tal característica nos permite clasificar estas métricas. Primero tendremos las **métricas invariantes LTT**:

$$G^{I/II} = \Theta^2 + (\xi_{ab} E^a I^b) (\chi_{cd} dE^c dI^d), \tag{2-5}$$

donde ξ_{ab} y χ_{cd} son matrices diagonales constantes; y segundo **las métricas invariantes LTT y LPT**:

$$G^{III} = \Theta^2 + (E_a I_a)^{2k+1} (dE^a dI^b), \tag{2-6}$$

donde $E_a = \delta_{ab} E^b$ y $I_a = \delta_{ab} I^b$. Ambas clases de métricas pueden escribirse de manera compacta como

$$G = \Theta^2 + h_{cd} dE^c dI^d, \tag{2-7}$$

con $h_{cd} = h_{cd}(\Phi, E^a, I^a)$, donde $\{a \in 1, \dots, n\}$. Con esto concluimos que **la estructura matemática del TPS es un tercia** (\mathcal{T}, Θ, G) . La idea principal de la GTD es que la métrica termodinámica describe las propiedades termodinámicas utilizando propiedades geométricas. La métrica termodinámica es seleccionada de tal forma que describa un sistema físico no importando el potencial termodinámico utilizado. Las propiedades termodinámicas de un sistema son independientes del potencial termodinámico utilizado para describirlas; la forma matemática de esta afirmación es la invarianza de Legendre. Esta idea es explicada en la siguiente sección.

2.2. El espacio de estados de equilibrio

El espacio de estados de equilibrio (TES) \mathcal{E} es una variedad diferencial de dimensión n representado por un conjunto de coordenadas $Z^a = \{E^a\}$ con $a \in \{1, \dots, n\}$; y definido como el encaje $\varphi : \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{T}$ dado por $\varphi : (E^a) \mapsto (\Phi(E^a), E^a, I^a(E^a))$ que satisface la condición $\varphi^*(\Theta) = 0$.

2.2.1. El sentido físico del TES

El sentido físico de la termodinámica está íntimamente ligado con la ecuación fundamental asociada a un fenómeno físico. Esto significa que para distinguir un sistema termodinámico de otro se debe especificar una ecuación fundamental. En el formalismo de la GTD **la ecuación fundamental está contenida en el encaje φ** ,

$$\Phi = \Phi(E^a). \quad (2-8)$$

Así mismo **la restricción del encaje φ dada por $\varphi_*(\Theta) = 0$ implica las condiciones de equilibrio termodinámico y la primera ley de la termodinámica**

$$\frac{\partial \Phi}{\partial E^a} = \delta_{ab} I^b, \quad (2-9)$$

$$d\Phi - \delta_{ab} I^a dE^b = 0; \quad (2-10)$$

Más aún, **la restricción de la ecuación fundamental a ser convexa en el caso de que Φ sea la entropía es equivalente a la segunda ley de la termodinámica**

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^a \partial E^b} \geq 0. \quad (2-11)$$

Adicionalmente un potencial termodinámico Φ debe de satisfacer **la condición de homogenidad**

$$\Phi(\lambda E^a) = \lambda^\beta \Phi(E^a), \quad (2-12)$$

donde λ y β son constantes. Esta condición es equivalente a **la identidad de Euler**

$$\beta \Phi(E^a) = \delta_{ab} I^a E^b, \quad (2-13)$$

la cual se obtiene al derivar (2 – 12) por λ , para despues tomar el caso $\lambda = 1$ y utilizar la relación (2 – 10).

Finalmente el formalismo de geometría diferencial puede ser utilizado en la identidad de Euler para obtener **la relación generalizada de Gibbs-Duhem**

$$(\beta - 1) \delta_{ab} I^a dE^b = \delta_{ab} E^a dI^b, \quad (2-14)$$

que se obtiene la derivada exterior de (2 – 13) y la relación (2 – 10). Al hacer $\beta = 1$ podemos recuperar la relación clásica de Gibbs-Duhem.

2.2.2. El TES como variedad de Riemann

La estructura de variedad de Riemann en el TES es inducida desde el TPS. Esto nos quiere decir que en \mathcal{E} podemos definir una métrica g dada por

$$\varphi^*(G) = g. \quad (2-15)$$

Con esto concluimos que la estructura matemática completa del TES es un **par** (\mathcal{E}, g) .

De manera particular, la métrica en (2 – 7) define una métrica

$$g = \begin{cases} (\xi_{ab} E^a \frac{\partial \Phi}{\partial E^b}) \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^c \partial E^d} \right) dE^c dE^d & \text{Para } G^{I/II} \\ (E^a \frac{\partial \Phi}{\partial E^b})^{2k+1} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^a \partial E^b} \right) dE^a dE^b & \text{Para } G^{III} \end{cases}, \quad (2-16)$$

La aplicación de la GTD a sistemas termodinámicos reside en el cálculo del tensor de Riemann R^a_{bcd} ; el tensor de Ricci R_{ab} y el escalar de Ricci R . A partir los casos particulares (2 – 5) y (2 – 6) de la métrica (2 – 16) y la elección de sistemas termodinámicos especificando un potencial termodinámico Φ , la GTD ha logrado relacionar propiedades geométricas de g con propiedades termodinámicas: Primero, la curvatura de (\mathcal{E}, g) es una medida de interacción termodinámica; segundo, las singularidades de curvatura en (\mathcal{E}, g) representan transiciones de fase; tercero, geodésicas termodinámicas en (\mathcal{E}, g) representan procesos cuasi-estáticos.

Finalizamos dando el enunciado principal de la termodinámica: *Un sistema termodinámico es descrito por una métrica termodinámica G en \mathcal{T} invariante ante transformaciones que no modifican su estructura de contacto; e induce en \mathcal{E} una métrica g que hereda el mismo carácter invariante.*

2.3. Referencias

Un resumen con las ideas básicas de la GTD es encontrado en (Quevedo *et al.* [2008b]). Para entender el proceso que llevo a la introducción del TPS y a la elección de una variedad de contacto se puede referir a (Mrugała [1985]). La idea de utilizar una variedad de contacto fue dada en principio en (Hermann [1973]), más en dicho trabajo aún no se mencionaba una variedad que sostuviera los procesos cuasi-estáticos. En el artículo (Mrugała *et al.* [1990]) se comienza a estudiar las sub-variedades de \mathcal{T} definidas por un encaje φ que cumpla la condición $\varphi^*(\Theta) = 0$ para una forma de contacto Θ ; y la condición $\varphi^*(\Theta) = 0$ es asociada con la primera ley de la termodinámica. La inducción de una métrica $g = \varphi^*(G)$ en \mathcal{E} a partir de una métrica G invariante LT es presentada por primera ocasión en el artículo (Quevedo [2007]). La aplicación a diferentes sistemas termodinámicos con dos grados de libertad es expuesto de manera general en el trabajo (Bravetti *et al.* [2014]). La GTD ha encontrado aplicaciones para el gas ideal y gas ideal de Bose-Einstein (Quevedo y Zaldivar [2015]), el gas de Van de Wals (Quevedo y Ramirez [2012]), agujeros negros (Quevedo y Sánchez [2009]) (Bravetti *et al.* [2013]), reacciones químicas (Quevedo y Tapias [2013]) y aplicaciones a modelos cosmológicos (Luongo y Quevedo [2015]). Invitamos al lector a que lean estas interesantes referencias.

Capítulo 3

Métricas de la Geometrotermodinámica

¿Por qué introducir una métrica de Riemann en la termodinámica? Esta pregunta es la que le da ese valor agregado al programa de la GTD. Para entender el hilo de ideas que nos llevan introducir las métricas de la GTD como aquellas que tienen un sentido físico fundamental es necesario realizar una bifurcación. Primero, demostrar que los mapeos armónicos son las herramientas matemáticas correctas para investigar las propiedades del TES (Quevedo *et al.* [2010]). Segundo, la construcción a mano de ellas resolviendo un sistema algebraico de ecuaciones (Quevedo [2007]). Del primer surco nace la primera respuesta: debido a que ellas nos relacionan un espacio físico con uno matemático llevandonos a que su comprensión nos permite definir qué es interacción dentro de un sistema termodinámico. De la segunda asa se sostiene la segunda respuesta: debido a que la podemos construir para ser única, general y sencilla.

En este capítulo exponemos las métricas Riemannianas del TPS en la GTD. La primera parte presenta la generalización de las métricas (2 – 5) y (2 – 6), mostrando las condiciones que debe de cumplir para ser invariantes LTT o LPT. En la segunda exhibimos un sistema de ecuaciones para calcular métricas invariantes LT; esto nos servirá para demostrar que las métricas de la GTD son las métricas invariantes LT más generales que contienen a la 1-forma de Gibbs.

3.1. Métrica generalizada de la GTD

La (2 – 7) es una ecuación compacta para las métricas de la GTD, que corresponden a las métricas más simples invariantes LT. Estas métricas son un caso particular de **la métrica GTD general invariante LT**

$$G = \Theta^2 + \Lambda h_{ab} dE^a dI^b, \quad (3-1)$$

donde $\Lambda = \Lambda(\Phi, E^c, I^c)$ y $h_{ab} = h_{ab}(E^c, I^c)$. Una simple inspección nos revela que (2 – 7) es (3 – 1) con el factor $\Lambda = 1$. Esta misma métrica es exclusivamente invariante LTT si se cumple la condición

$$\Lambda h_{ab} = -\tilde{\Lambda} \tilde{h}_{ab}, \quad (3-2)$$

donde $\tilde{\Lambda}$ y \tilde{h}_{ab} es el resultado de aplicar la LT a Λ y a h_{ab} . La condición que se debe de cumplir para ser del tipo invariante LPT es solamente aplicable a h_{ab} diagonales; de tal forma que los elementos diagonales deben ser

$$\Lambda h_{ii} = -\tilde{\Lambda} \tilde{h}_{ii} \quad (3-3)$$

$$\Lambda h_{jj} = \tilde{\Lambda} \tilde{h}_{jj} \quad (3-4)$$

donde $i \cup j$ es la descomposición disjunta del conjunto de índices $\{1, \dots, n\}$ que definen la LPT en (2 – 3).

3.2. Cómo encontrar métricas invariantes de Legendre

Las relaciones contenidas en la sección pasada nos indican la forma que debe de tener una métrica G invariante LT. Encontrar cada uno de los componentes de G requiere resolver el

sistema de ecuaciones planteado en (2 – 4). Para el caso $n = 2$ una LTT dada por:

$$\begin{aligned}
\Phi &= \tilde{\Phi} - \tilde{E}^1 \tilde{I}^1 - \tilde{E}^2 \tilde{I}^2 \\
E^1 &= -\tilde{I}^1 \\
E^2 &= -\tilde{I}^2 \\
I^1 &= \tilde{E}^1 \\
I^2 &= \tilde{E}^2.
\end{aligned} \tag{3-5}$$

le corresponde una matriz de transformación

$$\frac{\partial Z^C}{\partial \tilde{Z}^A} = \begin{pmatrix} 1 & -\tilde{I}_1 & -\tilde{I}_2 & -\tilde{E}_1 & -\tilde{E}_2 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3-6}$$

que al ser utilizada en (2 – 4) fija un sistema de ecuaciones para los componentes $G_{Z^A Z^B}$:

$$\begin{aligned}
\tilde{G}_{\Phi\Phi} &= G_{\Phi\Phi} \\
\tilde{G}_{\Phi E^a} &= -\tilde{I}^a G_{\Phi\Phi} + G_{\Phi I^a} \\
\tilde{G}_{\Phi I^a} &= -\tilde{E}^a G_{\Phi\Phi} - G_{\Phi E^a} \\
\tilde{G}_{E^a E^b} &= \tilde{I}^b \left(\tilde{I}^a G_{\Phi\Phi} - G_{\Phi I^a} \right) - \tilde{I}^a G_{\Phi I^b} + G_{I^a I^b} \\
\tilde{G}_{I^a I^b} &= \tilde{E}^b \left(\tilde{E}^a G_{\Phi\Phi} + G_{\Phi E^a} \right) + \tilde{E}^a G_{\Phi E^b} + G_{E^a E^b} \\
\tilde{G}_{E^a I^b} &= \tilde{I}^b \left(\tilde{E}^a G_{\Phi\Phi} + G_{\Phi E^a} \right) - \tilde{E}^a G_{\Phi I^b} - G_{E^a I^b} \\
\tilde{G}_{I^a E^b} &= \tilde{E}^b \left(\tilde{I}^a G_{\Phi\Phi} - G_{\Phi I^a} \right) + \tilde{I}^a G_{\Phi E^b} - G_{I^a E^b}.
\end{aligned} \tag{3-7}$$

Una forma fácil de construir métricas a partir de (3 – 7) es tomar el producto tensorial de la 1–forma de Gibbs Θ y sumarle elementos extras

$$G = \Theta \otimes \Theta + \Lambda h_{ab} dE^a \otimes dI^b + \Omega k_{ab} dI^a \otimes dI^b, \tag{3-8}$$

donde $\Lambda = \Lambda(E^c, I^c)$, $h_{ab} = h_{ab}(E^c, I^c)$, $\Omega = \Omega(E^c, I^c)$ y $k_{ab} = k_{ab}(E^c, I^c)$. Utilizando solamente que Θ es invariante TL podemos reducir el sistema (3 – 7) a:

$$\begin{aligned}
1 &= \tilde{G}_{\Phi\Phi} = 1 \\
-\tilde{I}^a &= \tilde{G}_{\Phi E^a} = -\tilde{I}^a \\
\tilde{G}_{I^a I^b} &= \tilde{G}_{\Phi I^a} = 0 \\
\tilde{I}^a \tilde{I}^b &= \tilde{G}_{E^a E^b} = \tilde{I}^b \tilde{I}^a + G_{I^a I^b} \\
\tilde{G}_{E^a I^b} &= -G_{E^a I^b} \\
\tilde{G}_{I^a E^b} &= -G_{I^a E^b}.
\end{aligned} \tag{3-9}$$

La conclusión inmediata es $G_{I^a I^b} = 0$ con lo que la métrica (3 – 8) se tranforma en la métrica generalizada (3 – 1) con la condición (3 – 2). Esto nos lleva a decir que *la métrica GTD general invariante LTT es la métrica más general que preserva el contactomorfismo $\Theta \rightarrow \tilde{\Theta}$.*

3.3. Referencias

Caracterizar a los encajes φ como mapeos armónicos fue expuesto por primera vez en (Quevedo *et al.* [2008a]). A su vez, esta misma idea es expuesta en (Quevedo *et al.* [2010]) dando el cálculo explícito para las métricas inducidas que provienen de (2 – 5) y (2 – 6). La construcción de las métricas, como se ha expuesto en este trabajo, esta contenida en (Quevedo [2007]); al utilizar un sistema algebraico deducido a partir de (3 – 7). Un trabajo en la dirección de estudiar las clases de métricas que son invariantes para generadores infinitesimales de transformaciones de Legendre es dado en (García-Peláez y López-Monsalvo [2014]). En (Bravetti *et al.* [2013]) se muestra explícitamente una métrica LTT cuya métrica inducida produce una curvatura independiente de la representación fundamental; la generalización de la misma es dada en (Azreg-AÃfnou [2014]). En esta tesis hemos calculado el tensor de Ricci y el escalar de Ricci para las métricas (2 – 5) y (2 – 6) en el apendice 1.

Capítulo 4

Contactomorfismos

La topología de contacto nació hace más de dos siglos con los trabajos de Huygens, Hamilton y Jacobi en la óptica geométrica (Alexanderson y Geiges [2006]). Grandes matemáticos han trabajado en ella, tales como Sophus Lie, Elie Cartan y Jean Gaston Darboux. El nombre original es *Berührungstransformation*, debido a Lie (1890)¹. En la pasada década ha tenido avances importantes convirtiéndose en una bella teoría con muchas aplicaciones potenciales. Dentro de ellas tenemos la dinámica no holonómica, la termodinámica (Mrugala *et al.* [1990]), la dinámica Hamiltoniana (Hofer [1993]) y la hidrodinámica (Etnyre y Ghrist [2000]).

Los apartados matemático que utilizamos a lo largo de este trabajo son las variedades de contacto, las formas de contacto y las transformaciones de contacto. El concepto principal a explicar en este capítulo son las transformaciones de contacto. Ellas las podemos entender como transformaciones de coordenadas que preservan una forma de contacto. Este capítulo está organizado de la siguiente forma: la primera sección da un ejemplo físico sobre la idea de una transformación de contacto; en la segunda sección exponemos las definiciones matemáticas precisas que se requieren; la sección final posiciona estas definiciones hacia la GTD relacionando el contactomorfismo entre las métricas G de la GTD y una métrica \tilde{G}^2 calculando lo que llamaremos las condiciones de integrabilidad.

¹Die infinitesimal en *Berührungstransformationen der Mechanik*, "Leipziger Berichte (1889), pp. 145-153. Lie-Scheffers, *Berührungstransformationen*, p. 102

²Cuya proyección al espacio de estados de equilibrio es una métrica Hessiana

4.1. La noción de contacto y el principio de Huygens

A primera instancia podría parecer que la característica de contacto es solamente una herramienta técnica, sin embargo, podemos darle un sentido físico y natural. El ejemplo seleccionado es el principio de Huygens. Sobre él vamos a construir los objetos matemáticos necesarios para darle el sentido de contacto.

Primero consideremos una curva suave $C \in \mathbb{R}^2$ sin tangentes verticales; ahora tomemos un elemento de línea en \mathbb{R}^2 visto como un punto en \mathbb{R}^3 dado por (x, y, p) donde $x, y \in \mathbb{R}^2$ y p es la pendiente de una línea que pasa por ese punto. Ahora interpretemos a estos objetos, pensemos en la curva $C = C(x, y)$ como un frente de ondas. Las líneas tangentes de C forman una curva de Legendre en \mathbb{R}^3 : $\tilde{C} = \tilde{C}(x, y, p)$ donde p es la pendiente de cada línea tangente. Esta curva es denominada de Legendre debido a que es la curva integral de la 1-forma de contacto $\eta = dx - pdy$

Demos ahora un nuevo frente de ondas $C_t = C_t(\bar{x}, \bar{y})$. A un tiempo t , el principio de Huygens nos dice que C_t es la envolvente de las ondas circulares centradas a todos los puntos de C^3 . Esto nos dice que para cada punto $(x, y) \in C$, el punto $(\bar{x}, \bar{y}) \in C_t$ está tanto en la línea normal al punto (x, y) como en el círculo de radio t centrado en el mismo punto. La relación normal es:

$$\bar{y} - y = -\frac{1}{p}(\bar{x} - x). \quad (4-1)$$

La segunda relación es escrita como:

$$(\bar{x} - x)^2 + (\bar{y} - y)^2 = t^2. \quad (4-2)$$

Las relaciones anteriores nos permiten encontrar una transformación $\chi : (x, y, p) \rightarrow (\bar{x}, \bar{y}, \bar{p})$ dada por:

³Donde tomamos el radio de como t y la velocidad de propagación como 1.

$$\begin{aligned}
\bar{x} &= x - \frac{pt}{\sqrt{p^2 + 1}}, \\
\bar{y} &= y - \frac{t}{\sqrt{p^2 + 1}}, \\
\bar{p} &= p.
\end{aligned}
\tag{4-3}$$

Dicha transformación además de relacionar las curvas C y C_t , lo hace también con las curvas de Legendre. Esto lo podemos demostrar al observar que

$$d\bar{y} - p d\bar{x} = dy - p dx,$$
(4-4)

siendo esto una forma de decir que la transformación preserva la forma de contacto.

4.2. Definiciones de objetos de contacto

4.2.1. Variedad de contacto

Una **variedad de contacto** \mathcal{T} es una par (\mathcal{T}, η) donde \mathcal{T} es una variedad C^∞ orientable de dimensión $2n + 1$ y η es una 1-forma de volumen para la cual se cumple **la condición de contacto** $\eta \wedge (d\eta)^n \neq 0$. A η se le denomina como **1-forma de contacto**. Para cualquier η que defina la variedad de contacto \mathcal{T} se asocian una **distribución de contacto** ξ dada por:

$$\xi = \ker(\eta).$$
(4-5)

Ejemplo 1: Considere la variedad \mathbb{R}^3 descrito por las coordenadas cartesianas $Z^A = \{x, y, z\}$; y a la 1-forma $\eta = dz + xdy$. Para este caso $\eta \wedge d\eta = dz \wedge dx \wedge dy \neq 0$, entonces el par (\mathbb{R}^3, η) es una variedad de contacto. La distribución de contacto ξ es generada por los vectores $\{\partial_x, x\partial_z - \partial_y\}$. Podemos crear una imagen mental de como es la distribución. Para la recta donde $x = 0$, los planos a cada punto en ella son horizontales; tomemos cualquier perpendicular a esta recta, para $x > 0$ los planos a cada punto giran en el sentido de las manecillas del reloj conforme x aumente llegando a un máximo de π en el punto $+\infty$. El efecto contrario se ve en los puntos $x < 0$ donde el giro será en sentido contrario de las manecillas del reloj.

Ejemplo 2: Considere la variedad \mathbb{R}^3 descrito por las coordenadas cilíndricas $Z^{\tilde{A}} = \{r, \theta, z\}$; y a la 1-forma $\tilde{\eta} = dz + r^2 d\theta$. Tendremos que $\tilde{\eta} \wedge d\tilde{\eta} = 2r dr \wedge d\theta \wedge dz \neq 0$, de tal forma que el par $(\mathbb{R}^3, \tilde{\eta})$ forman una variedad de contacto. Su distribución de contacto $\tilde{\xi}$ es generada por los vectores $\{\partial_r, r^2 \partial_z - \partial_\theta\}$. Aquí la imagen mental es muy similar a la anterior. La línea en donde todos los planos son verticales corresponderá al eje z . Para cada dirección radial perpendicular al eje z , los planos giran en sentido de las manecillas del reloj con un máximo de π en el infinito.

4.2.2. Contactomorfismo

Un difeomorfismo $\chi : \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{T}$ es llamada **transformación de contacto o contactomorfismo** si,

$$\chi^* \tilde{\eta} = f \eta, \quad (4-6)$$

donde η y $\tilde{\eta}$ son 1-formas de contacto y f es una función que no se anula en el dominio de χ . El caso particular en el cual f es idénticamente 1 decimos que χ es un **contactomorfismo estricto**.

Para los ejemplos 1 y 2 podemos definir el contactomorfismo

$$\begin{aligned} x &= r^2, \\ y &= \theta, \\ z &= z; \end{aligned} \quad (4-7)$$

y demostrar que lo es a partir de aplicar la derivada exterior a $\tilde{\eta}$ y substituir el difeomorfismo en ella, $d(z = z) - (r^2 = x) d(\theta = y) = dz - x dy$.

4.3. Condición de integrabilidad de F para χ

Esta sección presenta el primer cálculo fundamental del presente trabajo. Por un lado tenemos las métricas de la GTD (2 – 7) y por otro lado la métrica

$$\tilde{G} = \tilde{\Theta}^2 + \delta_{ab} dX^a dY^a, \quad (4-8)$$

con la 1-forma

$$\tilde{\Theta} = f_0 dF - f_a Y_a dX^a \quad (4-9)$$

en la que $f_{0,a} = f_{0,a}(F, X^a, Y^a)$ y $f_{0,a} \neq 0 \in C^\infty$.

El caracter principal de esta métrica, representada en el sistema de coordenadas $Z^{\tilde{A}} = \{F, X^a, Y^a\}$, es su proyección $\tilde{\varphi} : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{T}$ dado por $\tilde{\varphi} : (X^a) \mapsto (F(X^a), X^a, Y^a(X^a))$; la cual puede ser entendido como un encaje \mathcal{F} de \mathcal{T} siendo entonces \mathcal{F} una variedad n dimensional.

Al presentar una difeomorfismo $\chi : \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{T}$ que relacione la 1-forma $\tilde{\Theta}$ con la estructura de contacto Θ obtendríamos una interpretación física de F como un potencial termodinámico. El resto de este capítulo se dedica a encontrar dicha relación $\Theta \stackrel{\chi}{\cong} \tilde{\Theta}$ exaltandola como la primera afirmación principal de esta tesis.

AFIRMACIÓN 1: Sea $\chi : \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{T}$ un difeomorfismo de $\chi : \{Z^A\} \rightarrow \{Z^{\tilde{A}}\}$ con $Z^{\tilde{A}} = \{F, X^a, Y^a\}$ y $Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\}$ donde $a \in \{1, \dots, n\}$. Tomando la 1-forma de contacto en las coordenadas Z^A como $\Theta = d\Phi - I_a dE^a$ y la 1-forma de contacto $\tilde{\Theta} = f_0 dF - f_a Y_a dX^a$ con $f_{0,a} = f_{0,a}(F, X^a, Y^a)$. Entonces **la condición de integrabilidad para $\Theta \stackrel{\chi}{\cong} \tilde{\Theta}$ es:**

$$f_c \{X^c, Y_c\}_{\Phi E^a} = f_c \{X^c, Y_c\}_{\Phi I^a} = f_c \{X^c, Y_c\}_{E^a E^b} = f_c \{X^c, Y_c\}_{I^a I^b} = 0 \quad (4-10)$$

$$f_c \{X^c, Y_c\}_{E^a I^b} = \delta_{ab} \quad (4-11)$$

con:

$$\{X^c, Y_c\}_{Z^A Z^B} = \frac{\partial X^c}{\partial Z^A} \frac{\partial Y_c}{\partial Z^B} - \frac{\partial X^c}{\partial Z^B} \frac{\partial Y_c}{\partial Z^A} \quad (4-12)$$

donde $a, b, c \in \{1, \dots, n\}$.

4.3.1. Demostración de la condición de integrabilidad para χ

Partiendo de que $\Theta \stackrel{\chi}{\cong} \tilde{\Theta}$, esto lo escribimos como:

$$\Theta_{Z^A} dZ^A = \Theta_{Z^{\tilde{A}}} \frac{\partial Z^{\tilde{A}}}{\partial Z^A} dZ^A \quad (4-13)$$

Para cada \tilde{Z}^A esta condición es en detalle:

$$\begin{aligned}
1 &= f_0 \frac{\partial F}{\partial \Phi} - f_a Y_a \frac{\partial X^a}{\partial \Phi} \\
-I^b &= f_0 \frac{\partial F}{\partial E^b} - f_a Y_a \frac{\partial X^a}{\partial E^b} \\
0 &= f_0 \frac{\partial F}{\partial I^b} - f_a Y_a \frac{\partial X^a}{\partial I^b}
\end{aligned} \tag{4-14}$$

con $Y_a = \delta_{ad} Y^d$. Además son equivalentes a:

$$\frac{\partial F}{\partial \Phi} = \frac{f_a Y_a}{f_0} \frac{\partial X^a}{\partial \Phi} + \frac{1}{f_0} \tag{4-15}$$

$$\frac{\partial F}{\partial E^b} = \frac{f_a Y_a}{f_0} \frac{\partial X^a}{\partial E^b} - \frac{I^b}{f_0} \tag{4-16}$$

$$\frac{\partial F}{\partial I^b} = \frac{f_a Y_a}{f_0} \frac{\partial X^a}{\partial I^b} \tag{4-17}$$

Partiendo de la condición de igualdad para parciales mixtas encontramos cinco condiciones:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \Phi \partial I^b} = \frac{\partial^2 F}{\partial I^b \partial \Phi}; \tag{4-18}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \Phi \partial E^b} = \frac{\partial^2 F}{\partial E^b \partial \Phi} \tag{4-19}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial E^b \partial I^b} = \frac{\partial^2 F}{\partial I^b \partial E^b} \tag{4-20}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial E^b \partial E^a} = \frac{\partial^2 F}{\partial E^a \partial E^b} \tag{4-21}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial I^b \partial I^a} = \frac{\partial^2 F}{\partial I^a \partial I^b} \tag{4-22}$$

Primera condición de integrabilidad

Aplicamos las parciales de la siguiente forma

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \Phi \partial I^b} = \frac{\partial^2 F}{\partial I^b \partial \Phi} \tag{4-23}$$

donde el lado izquierdo viene de aplicar $\frac{\partial}{\partial \Phi}$ a (4 – 17) y el lado derecho de $\frac{\partial}{\partial I^b}$ a (4 – 15)

$$\frac{\partial}{\partial \Phi} \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial X^a}{\partial I^b} \right) = \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial^2 X^a}{\partial \Phi \partial I^b} \right) + \left(\frac{f_a}{f_0} \frac{\partial X^a}{\partial I^b} \frac{\partial Y_a}{\partial \Phi} \right) + \left(Y_a \frac{\partial X^a}{\partial I^b} \frac{\partial f_a / f_0}{\partial \Phi} \right) \quad (4-24)$$

$$\frac{\partial}{\partial I^b} \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial X^a}{\partial \Phi} + \frac{1}{f_0} \right) = \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial^2 X^a}{\partial I^b \partial \Phi} \right) + \left(\frac{f_a}{f_0} \frac{\partial X^a}{\partial \Phi} \frac{\partial Y_a}{\partial I^b} \right) + \left(Y_a \frac{\partial X^a}{\partial \Phi} \frac{\partial f_a / f_0}{\partial I^b} \right) + \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial I^b} \quad (4-25)$$

Lo cuál implica la ecuación:

$$\frac{f_a}{f_0} \{X^a, Y_a\}_{\Phi I^b} + Y_a \left\{ X^a, \frac{f_a}{f_0} \right\}_{\Phi I^b} = \frac{f_a}{f_0} Y_a \left(\frac{\partial^2 X^a}{\partial \Phi \partial I^b} - \frac{\partial^2 X^a}{\partial I^b \partial \Phi} \right) - \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial I^b} \quad (4-26)$$

Utilizando que las parciales mixtas son iguales, i.e., $\frac{\partial^2 X^a}{\partial \Phi \partial I^b} = \frac{\partial^2 X^a}{\partial I^b \partial \Phi}$ y que f con depende explicitamente de las Z^A

$$\frac{f_a}{f_0} \{X^a, Y_a\}_{\Phi I^b} = 0 \quad (4-27)$$

Segunda condición de integrabilidad

Aplicamos para:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \Phi \partial E^b} = \frac{\partial^2 F}{\partial E^b \partial \Phi} \quad (4-28)$$

donde el lado izquierdo viene de aplicar $\frac{\partial}{\partial \Phi}$ a (4 – 16) y el lado derecho de $\frac{\partial}{\partial E^b}$ a (4 – 15)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Phi} \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial X^a}{\partial E^b} - \frac{I^b}{f_0} \right) &= \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial^2 X^a}{\partial \Phi \partial E^b} \right) + \left(\frac{f_a}{f_0} \frac{\partial X^a}{\partial E^b} \frac{\partial Y_a}{\partial \Phi} \right) + \left(Y_a \frac{\partial X^a}{\partial E^b} \frac{\partial f_a / f_0}{\partial \Phi} \right) - I^b \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial \Phi} \\ \frac{\partial}{\partial E^b} \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial X^a}{\partial \Phi} + \frac{1}{f_0} \right) &= \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial^2 X^a}{\partial E^b \partial \Phi} \right) + \left(\frac{f_a}{f_0} \frac{\partial X^a}{\partial \Phi} \frac{\partial Y_a}{\partial E^b} \right) + \left(Y_a \frac{\partial X^a}{\partial \Phi} \frac{\partial f_a / f_0}{\partial E^b} \right) + \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial E^b} \end{aligned} \quad (4-29)$$

Lo cual implica la ecuación:

$$\frac{f_a}{f_0} \{X^a, Y_a\}_{\Phi E^b} + Y_a \left\{ X^a, \frac{f_a}{f_0} \right\}_{\Phi E^b} = \frac{f_a}{f_0} Y_a \left(\frac{\partial^2 X^a}{\partial \Phi \partial E^b} - \frac{\partial^2 X^a}{\partial E^b \partial \Phi} \right) - I^b \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial \Phi} - \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial E^b} \quad (4-31)$$

Utilizando que las parciales mixtas son iguales, i.e., $\frac{\partial^2 X^a}{\partial \Phi \partial E^b} = \frac{\partial^2 X^a}{\partial E^b \partial \Phi}$ y que f con depende explicitamente de las Z^A

$$\frac{f_a}{f_0} \{X^a, Y_a\}_{\Phi E^b} = 0 \quad (4-32)$$

Tercera condición de integrabilidad

Aplicamos las parciales haciendolo de la siguiente forma

$$\frac{\partial^2 F}{\partial E^b \partial I^b} = \frac{\partial^2 F}{\partial I^b \partial E^b} \quad (4-33)$$

donde el lado izquierdo viene de aplicar $\frac{\partial}{\partial E^b}$ a (4 – 17) y el lado derecho de $\frac{\partial}{\partial I^b}$ a (4 – 16)

$$\frac{\partial}{\partial E^c} \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial X^a}{\partial I^b} \right) = \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial^2 X^a}{\partial E^c \partial I^b} \right) + \left(\frac{f_a}{f_0} \frac{\partial X^a}{\partial I^b} \frac{\partial Y_a}{\partial E^c} \right) + \left(Y_a \frac{\partial X^a}{\partial I^b} \frac{\partial f_a/f_0}{\partial E^c} \right) \quad (4-34)$$

$$\frac{\partial}{\partial I^b} \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial X^a}{\partial E^c} - \frac{I^c}{f_0} \right) = \left(\frac{f_a}{f_0} Y_a \frac{\partial^2 X^a}{\partial I^b \partial E^c} \right) + \left(\frac{f_a}{f_0} \frac{\partial X^a}{\partial E^c} \frac{\partial Y_a}{\partial I^b} \right) + \left(Y_a \frac{\partial X^a}{\partial E^c} \frac{\partial f_a/f_0}{\partial I^b} \right) - \frac{\delta_{ac}}{f_0} - I^c \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial I^b} \quad (4-35)$$

Lo cual implica la ecuación:

$$\frac{f_a}{f_0} \{X^a, Y_a\}_{E^c I^b} + Y_a \left\{ X^a, \frac{f_a}{f_0} \right\}_{E^c I^b} = \frac{f_a}{f_0} Y_a \left(\frac{\partial^2 X^a}{\partial E^c \partial I^b} - \frac{\partial^2 X^a}{\partial I^b \partial E^c} \right) + I^c \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial I^b} + \frac{\delta_{bc}}{f_0} \quad (4-36)$$

Utilizando que las parciales mixtas son iguales, i.e., $\frac{\partial^2 E^a}{\partial X^c \partial Y^b} = \frac{\partial^2 E^a}{\partial Y^b \partial X^c}$ y que $f_{0,a}$ no depende explicitamente de las Z^A

$$f_a \{X^a, Y_a\}_{E^c I^b} = \delta_{bc} \quad (4-37)$$

Cuarta condición de integrabilidad

Aplicamos las parciales haciendolo de la siguiente forma

$$\frac{\partial^2 F}{\partial E^b \partial E^a} = \frac{\partial^2 F}{\partial E^a \partial E^b} \quad (4-38)$$

donde el lado izquierdo viene de aplicar $\frac{\partial}{\partial E^b}$ a (4 – 16) y el lado derecho de $\frac{\partial}{\partial E^a}$ a (4 – 16)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial E^b} \left(f_c Y_c \frac{\partial X^c}{\partial E^a} - \frac{I^a}{f_0} \right) &= \left(\frac{f_a}{f_0} Y_c \frac{\partial^2 X^c}{\partial E^b \partial E^a} \right) + \left(\frac{f_c}{f_0} \frac{\partial X^c}{\partial E^a} \frac{\partial Y_c}{\partial E^b} \right) + \left(Y_c \frac{\partial X^c}{\partial E^a} \frac{\partial f_c / f_0}{\partial E^b} \right) + \frac{\delta_{ab}}{f_0} - I^a \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial E^b} \\ \frac{\partial}{\partial E^a} \left(f_c Y_c \frac{\partial X^c}{\partial E^b} - \frac{I^b}{f_0} \right) &= \left(\frac{f_a}{f_0} Y_c \frac{\partial^2 X^c}{\partial E^a \partial E^b} \right) + \left(\frac{f_c}{f_0} \frac{\partial X^c}{\partial E^b} \frac{\partial Y_c}{\partial E^a} \right) + \left(Y_c \frac{\partial X^c}{\partial E^b} \frac{\partial f_c / f_0}{\partial E^a} \right) + \frac{\delta_{ab}}{f_0} - I^b \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial E^a} \end{aligned}$$

Lo cual implica la ecuación:

$$\frac{f_c}{f_0} \{X^c, Y_c\}_{E^a E^b} + Y_c \left\{ X^c, \frac{f_c}{f_0} \right\}_{E^a E^b} = \frac{f_c}{f_0} Y_c \left(\frac{\partial^2 X^c}{\partial E^a \partial E^b} - \frac{\partial^2 X^c}{\partial E^b \partial E^a} \right) - I^b \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial E^a} + I^a \frac{\partial f_0^{-1}}{\partial E^b} \quad (4-41)$$

Utilizando que las parciales mixtas son iguales, i.e., $\frac{\partial^2 X^c}{\partial E^a \partial E^b} = \frac{\partial^2 X^c}{\partial E^b \partial E^a}$ y que f con depende explicitamente de las Z^A

$$\frac{f_a}{f_0} \{X^c, Y_c\}_{E^a E^b} = 0 \quad (4-42)$$

Quinta condición de integrabilidad

Aplicamos las parciales haciendolo de la siguiente forma

$$\frac{\partial^2 F}{\partial I^b \partial I^a} = \frac{\partial^2 F}{\partial I^a \partial I^b} \quad (4-43)$$

donde el lado izquierdo viene de aplicar $\frac{\partial}{\partial I^b}$ a (4 – 17) y el lado derecho de $\frac{\partial}{\partial I^a}$ a (4 – 17)

$$\frac{\partial}{\partial I^b} \left(f_c Y_c \frac{\partial X^c}{\partial I^a} \right) = \left(\frac{f_a}{f_0} Y_c \frac{\partial^2 X^c}{\partial I^b \partial I^a} \right) + \left(\frac{f_c}{f_0} \frac{\partial X^c}{\partial I^a} \frac{\partial Y_c}{\partial I^b} \right) + \left(Y_c \frac{\partial X^c}{\partial I^a} \frac{\partial f_c / f_0}{\partial I^b} \right) \quad (4-44)$$

$$\frac{\partial}{\partial I^a} \left(f_c Y_c \frac{\partial X^c}{\partial I^b} \right) = \left(\frac{f_a}{f_0} Y_c \frac{\partial^2 X^c}{\partial I^a \partial I^b} \right) + \left(\frac{f_c}{f_0} \frac{\partial X^c}{\partial I^b} \frac{\partial Y_c}{\partial I^a} \right) + \left(Y_c \frac{\partial X^c}{\partial I^b} \frac{\partial f_c / f_0}{\partial I^a} \right) \quad (4-45)$$

Lo cual implica la ecuación:

$$\frac{f_c}{f_0} \{X^c, Y_c\}_{I^a I^b} + Y_c \left\{ X^c, \frac{f_c}{f_0} \right\}_{I^a I^b} = \frac{f_c}{f_0} Y_c \left(\frac{\partial^2 X^c}{\partial I^b \partial I^a} - \frac{\partial^2 X^c}{\partial I^a \partial I^b} \right) \quad (4-46)$$

Utilizando que las parciales mixtas son iguales, i.e., $\frac{\partial^2 X^c}{\partial I^b \partial I^a} = \frac{\partial^2 X^c}{\partial I^a \partial I^b}$

$$\frac{f_a}{f_0} \{X^c, Y_c\}_{I^a I^b} = 0 \quad (4-47)$$

Capítulo 5

Interpretación estadística de las métricas geometrotermodinámicas

Las propiedades termodinámicas de un sistema pueden ser obtenidas de las características e interacciones de sus partículas constituyentes a través de la física estadística. Mas la termodinámica puede jugar el papel inverso: dar información de un sistema microscópico. Una forma en la cual podemos obtener este tipo de información es utilizando la teoría de fluctuaciones. La importancia de estudiar la fluctuación de alguna propiedad termodinámica es que juega un papel crucial en diversos fenómenos físicos y en las aplicaciones tecnológicas que de estos se derivan. Las fluctuaciones son de particular importancia en sistemas a escala nanométrica; en dichos sistemas afectan el rendimiento, dado que de ellas derivan variabilidades funcionales que nos llevan a introducir ruido dentro de cualquier sistema. Como ejemplos tenemos el cálculo de coeficientes elásticos para medir la tensión y el estrés en dinámica de moléculas (Parrinello [1982]) o simulaciones de Monte Carlo (Meyers *et al.* [2005]) en el cálculo de propiedades molares en soluciones que provienen de la fluctuación de su concentración (Debenedetti [1987]); así como el cálculo de la energía libre en interfaces solido-liquido (Amini y Laird [2008]), sólido-sólido (Adland *et al.* [2013]).

El propósito central de esta tesis está contenido en este capítulo: *¿cómo podemos relacionar las métricas de la GTD con distribuciones de probabilidad?* La forma en la que lo hacemos es llevando las métricas de la GTD, via un difeomorfismo, hacia una métrica que al ser proyectada

al TES tiene la característica de ser Hessiana; siendo este el punto de partida para utilizarla dentro de la aproximación Gaussiana de la teoría de fluctuaciones.

En la primera sección de este capítulo examinamos la teoría de las fluctuaciones en su aproximación Gaussiana (Landau y Lifshitz [1988]). La segunda sección presenta el difeomorfismo entre la métrica G en (2 – 7) y \tilde{G} de (4 – 8). La tercera y cuarta sección exponen una discusión sobre las soluciones, dando una solución general. Esta solución es explorada para el caso $n = 2$ obteniendo como resultados una clasificación de ella. La última sección presenta una aplicación detallada para el caso de G^{III} , encontrando un difeomorfismo completo.

5.1. Teoría de fluctuaciones Gaussiana

Algunas propiedades de los sistemas termodinámicos aislados están completamente fijas por leyes de conservación, otras pueden variar. Si un sistema permanece aislado por un largo tiempo, la termodinámica nos dice que las cantidades no conservadas dejan de variar y se mantienen constantes, llegando a un estado de equilibrio termodinámico. Sin embargo, aún después de llegar al equilibrio, ciertas propiedades no conservativas continúan variando en lapsos pequeños (Mishin [2015]). Este tipo de variaciones continuas de un sistema en equilibrio es a lo que se le llama fluctuaciones del equilibrio. Durante estas fluctuaciones cualquier propiedad física se desvía de manera aleatoria de su valor promedio. La meta principal de la teoría de fluctuaciones es predecir una distribución de probabilidad para cualquiera de estas propiedades y sus promedios al calcular elementos estadísticos de la distribución.

Para la entropía S en la ecuación de Boltzmann $S = k_B \ln \Omega^1$, una distribución de probabilidad puede ser asociada cuando las temperaturas no son demasiado bajas o las variaciones no son demasiado rápidas². Esta distribución relaciona la desviación de una serie de magnitudes de sus valores medios. Representando la desviación por los valores (E^1, \dots, E^n) , podemos asumir que para un punto E_0 , donde la entropía S es máxima, esta distribución particular $P(E^1, \dots, E^n)$ puede ser representada como una **distribución de probabilidad de Gauss**:

¹ k_B corresponde a la constante de Boltzmann y Ω al número de microestados.

²A partir del principio de incertidumbre podemos deducir que $T \gg \hbar/\tau$, donde τ es el tiempo de la variación y T la temperatura del sistema.

$$P(E^1, \dots, E^n) dE^1 \dots dE^n = \sqrt{\frac{\det g}{(2\pi)^n}} \exp(g_{ab} E^a E^b) dE^1 \dots dE^n \quad (5-1)$$

con

$$g_{ab} = -\frac{1}{2k_B} \left. \frac{\partial^2 S}{\partial E^a \partial E^b} \right|_{E_0} \quad (5-2)$$

donde $a, b \in \{1, \dots, n\}$. La ecuación (5 – 2) es comunmente llamada **la matriz de estabilidad**. Al contar con la distribución de probabilidad de Gauss podemos relacionar las fluctuaciones con propiedades de equilibrio de un sistema termodinámico. Estadísticamente podemos determinar **la fluctuación cuadrática media de ϕ** :

$$\langle (\Delta\phi)^2 \rangle = \frac{\partial\phi}{\partial E^a} \frac{\partial\phi}{\partial E^b} g^{ab}, \quad (5-3)$$

donde ϕ es una función cualquiera $\phi = \phi(E^1, \dots, E^n)$ y g^{ab} es la inversa de la matriz de estabilidad. Es a partir de la ecuación (5 – 3) que se destaca una relación de fluctuaciones con elementos que pueden ser calculados por el formalismo estandar de termodinámica.

5.2. Ecuaciones del difeomorfismo χ

En esta sección exponemos el segundo cálculo fundamental de esta tesis. La primera parte de la relación entre la métrica G dada en (2 – 7) y la métrica \tilde{G} formulada en (4 – 8), a nivel de las 1–formas $\tilde{\Theta}$ y Θ , fue expuesta en el capítulo anterior. Dicha relación es completada ahora dando el difeomorfismo χ entre ambas métricas con la condición de preservar la estructura de contacto. La relación que ahora cobra fuerza es aquella entre $h_{ab} dE^a \otimes dI^b$ de G y $\delta_{ab} dX^a \otimes dY^b$ de \tilde{G} ; estas relaciones nos conducen a un conjunto de ecuaciones que al resolverlas nos permiten encontrar X^a como $X^a = X^a(Z^A)$ y a Y^a como $Y^a = Y^a(Z^A)$. En consecuencia la integración de $F = F(Z^A)$ es garantizada si se cumplen las relaciones (4 – 10) y (4 – 11). A continuación presentamos el calculo del difeomorfismo completo χ aplicado entre las métricas G y \tilde{G} al realizar una afirmación.

AFIRMACIÓN 2: Sea $\chi : T \longrightarrow T$ un difeomorfismo de $\chi : \{Z^A\} \longrightarrow \{Z^{\tilde{A}}\}$ con $Z^{\tilde{A}} = \{F, X^a, Y^a\}$ y $Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\}$, donde $a \in \{1, \dots, n\}$. Tomando la 1–forma de contacto en las coordenadas Z^A como $\Theta = d\Phi - I_a dE^a$ y la 1–forma de contacto $\tilde{\Theta} = f_0 dF - f_a Y_a dX^a$ con

$f_{0,a} = f_{0,a}(F, X^a, Y^a)$ en las coordenadas $Z^{\tilde{A}}$. Construyamos la métrica $\tilde{G} = \tilde{\Theta} \otimes \tilde{\Theta} + \delta_{ab} dX^a \otimes dY^b$ y la métrica $G = \Theta \otimes \Theta + h_{ab} dE^a \otimes dI^b$, con $h_{ab} = h_{ab}(\Phi, E^a, I^a)$ diagonal e invariante de Legendre.

Entonces las $(2\mathbf{n} + 1)(\mathbf{n} + 1)$ ecuaciones del difeomorfismo $G \stackrel{\chi}{\cong} \tilde{G}$ puede ser escritas como:

$$[X^c, Y_c]_{\Phi E^a} = [X^c, Y_c]_{\Phi I^a} = [X^c, Y_c]_{E^a E^b} = [X^c, Y_c]_{\Phi \Phi} = [X^c, Y_c]_{I^a I^b} = 0 \quad (5-4)$$

$$[X^c, Y_c]_{E^a I^b} = h_{ab} \quad (5-5)$$

con:

$$[X^c, Y_c]_{Z^A Z^B} = \frac{\partial X^c}{\partial Z^A} \frac{\partial Y_c}{\partial Z^B} + \frac{\partial X^c}{\partial Z^B} \frac{\partial Y_c}{\partial Z^A} \quad (5-6)$$

5.2.1. Cálculo de las ecuaciones del difeomorfismo χ

Escribamos $G \stackrel{\chi}{\cong} \tilde{G}$ como

$$\begin{aligned} G_{Z^A Z^B} dZ^A \otimes dZ^B &= G_{Z^{\tilde{A}} Z^{\tilde{B}}} \frac{\partial Z^{\tilde{A}}}{\partial Z^A} \frac{\partial Z^{\tilde{B}}}{\partial Z^B} dZ^A \otimes dZ^B \\ &= \tilde{\Theta} \otimes \tilde{\Theta} + \delta_{ab} \left(\frac{\partial X^a}{\partial Z^A} \frac{\partial Y^b}{\partial Z^B} + \frac{\partial X^a}{\partial Z^B} \frac{\partial Y^b}{\partial Z^A} \right) dZ^A \otimes dZ^B \\ &= (H_{Z^A} H_{Z^B} + [X^a, Y_a]_{Z^A Z^B}) dZ^A \otimes dZ^B \end{aligned} \quad (5-7)$$

con

$$[X^c, Y_c]_{Z^A Z^B} = \frac{\partial X^c}{\partial Z^A} \frac{\partial Y_c}{\partial Z^B} + \frac{\partial X^c}{\partial Z^B} \frac{\partial Y_c}{\partial Z^A} \quad (5-8)$$

y

$$H_{Z^A} = f_0 \frac{\partial F}{\partial Z^A} - f_a Y_a \frac{\partial X^a}{\partial Z^A}, \quad (5-9)$$

que ya han sido calculadas en (4 – 14).

Ahora tomemos las ecuaciones componente por componente:

$$1 = H_\Phi H_\Phi + [X^c, Y_c]_{\Phi\Phi} = 1 + [X^c, Y_c]_{\Phi\Phi} \quad (5-10)$$

$$-I^a = H_\Phi H_{E^a} + [X^c, Y_c]_{\Phi E^a} = -I^a + [X^c, Y_c]_{\Phi E^a} \quad (5-11)$$

$$0 = H_\Phi H_{I^a} + [X^c, Y_c]_{\Phi I^a} = [X^c, Y_c]_{\Phi I^a} \quad (5-12)$$

$$I^a I^b = H_{E^a} H_{E^b} + [X^c, Y_c]_{E^a E^b} = I^a I^b + [X^c, Y_c]_{E^a E^b} \quad (5-13)$$

$$0 = H_{I^a} H_{I^b} + [X^c, Y_c]_{I^a I^b} = [X^c, Y_c]_{I^a I^b} \quad (5-14)$$

$$h_{ab} = H_{E^a} H_{I^b} + [X^c, Y_c]_{E^a I^b} = [X^c, Y_c]_{E^a I^b} \quad (5-15)$$

De las cuales concluimos:

$$[X^c, Y_c]_{\Phi\Phi} = [X^c, Y_c]_{\Phi E^a} = [X^c, Y_c]_{\Phi I^a} = [X^c, Y_c]_{E^a E^b} = [X^c, Y_c]_{I^a I^b} = 0 \quad (5-16)$$

$$h_{ab} = [X^c, Y_c]_{E^a I^b}. \quad (5-17)$$

El número de ecuaciones en (5 – 16) y (5 – 17) es calculado de la siguiente manera: 1 ecuación para $[X^c, Y_c]_{\Phi\Phi}$, n ecuaciones para $[X^c, Y_c]_{\Phi E^a}$ y $[X^c, Y_c]_{\Phi I^a}$; $\frac{n(n+1)}{2}$ ecuaciones para $[X^c, Y_c]_{E^a E^b}$ y $[X^c, Y_c]_{I^a I^b}$; n^2 ecuaciones para $[X^c, Y_c]_{E^a I^b}$.

5.3. Soluciones lineales

Con el proposito de resolver las ecuaciones (5 – 4) y (5 – 5) planteamos primero las soluciones de tipo lineal.

$$X^c = \alpha^c \Phi + \beta_d^c E^d + \psi_d^c I^d \quad (5-18)$$

$$Y^c = \delta^c \Phi + \varepsilon_d^c E^d + \gamma_d^c I^d \quad (5-19)$$

donde $\alpha^c, \beta_d^c, \psi_d^c, \delta^c, \varepsilon_d^c, \gamma_d^c \in \mathbb{R}$ son constantes a determinar. Estas constantes debemos de utilizarlos en el sistema de ecuaciones $[X^c, Y_c]_{Z^A Z^B}$. De tal forma que tenemos $2n(2n+1)^3$ con-

³El conteo es de la siguiente forma: n constantes para α^c y δ^c ; n^2 para $\beta_d^c, \psi_d^c, \varepsilon_d^c$ y γ_d^c .

stantes a determinar para $(2n + 1)(n + 1)$ ecuaciones (5 – 4) y (5 – 5).

Aplicando (5 – 18) y (5 – 19) a (5 – 5) tendremos:

$$h_{ab} = [X^c, Y_c]_{E^a I^b} = \beta_a^c \gamma_{cb} + \psi_a^c \varepsilon_{cb}. \quad (5-20)$$

La ecuación (5 – 20) implicaría que h_{ab} es una constante, de tal forma que **no corresponde con ninguna de las métricas de la GTD**. Más aún, si utilizamos la condición de integrabilidad tendríamos:

$$\delta_{ab} = f_c \{X^c, Y_c\}_{E^a I^b} = f_c (\beta_a^c \gamma_{cb} - \psi_a^c \varepsilon_{cb}), \quad (5-21)$$

lo cuál implicaría que las f_c son tambien una constantes.

Este tipo de soluciones es una guía para buscar soluciones que realmente sean compatibles con las métricas de la GTD. El método a aplicar consistirá en buscar una solución que nos pueda producir dichas métricas.

5.4. Soluciones más generales aplicables a las métricas de la GTD

Las soluciones lineales nos han demostrado que no todos los difeomorfismos pueden ser aplicables a las métricas (2 – 5) o (2 – 6). La clave para construirlas esta en tomar a $h_{ab} = \xi_{ab} E^a I^b$. Tendremos que para h_{ab} en el lado izquierdo de (5 – 5) habra que encontrar relaciones $X^a = X^a(Z^A)$ y $Y^a = Y^a(Z^B)$ del lado derecho que contengan a los elementos $\xi_{ab} E^a I^b$. Este tipo de soluciones las denominamos como **los difeomorfismos generales**:

$$X^c = \Pi_{abcd}^c (E^a)^m (E^b)^n (I^e)^{(1-r)} (I^d)^{(1-s)} + \alpha^c \Phi + \beta_d^c E^d + \psi_d^c I^d, \quad (5-22)$$

$$Y^c = \Psi_{abcd}^c (E^a)^{(1-m)} (E^b)^{(1-n)} (I^e)^r (I^d)^s + \delta^c \Phi + \varepsilon_d^c E^d + \gamma_d^c I^d, \quad (5-23)$$

donde $\alpha^c, \beta_d^c, \psi_d^c, \delta^c, \varepsilon_d^c, \gamma_d^c, \Pi_{abcd}^c, \Psi_{abcd}^c \in \mathbb{R}$ son constantes a determinar.

⁴Para $n = 2$ corresponde a una matriz $h_{ab} = \begin{pmatrix} \xi_{11} E^1 I^1 + \xi_{12} E^2 I^2 & 0 \\ 0 & \xi_{12} E^1 I^1 + \xi_{22} E^2 I^2 \end{pmatrix}$

5.4.1. Clasificación de las soluciones generales

Inmediatamente nos podemos preguntar si los difeomorfismos (5 – 22) y (5 – 23) tienen alguna otra cualidad que nos pueda auxiliar en la búsqueda de soluciones. La respuesta viene dada en que nos permite hacer una clasificación basandonos en las potencias m , n , r y s ; las cuales podemos caracterizarlas por el vector de clasificación $q = (m, n, r, s)$. La importancia de citada clasificación se encuentra al realizar el cálculo de los paréntesis (5 – 4) y (5 – 5).

En la práctica, nosotros obtuvimos todos los sistemas (5 – 4)-(5 – 5) y los (4 – 10)-(4 – 11) para el caso $n = 2$ utilizando un lenguaje de cálculo simbólico, los detalles del mismo pueden ser encontrados en el anexo 2. El número de ecuaciones generadas ascendió a 4, 517; más dentro de ellas aparecieron patrones de semejanza; tomando combinaciones de las constantes Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c ; permitiendo reducir el sistema. Observamos que el número de reducciones depende de los tipos de clasificaciones $q = (m, n, r, s)$.

De todos los tipos de sistemas, aquellos que permiten obtener métricas del tipo (2 – 5) se obtienen solamente de clasificaciones que cumple con el criterio

$$\begin{aligned} m + n &= 2, \\ r + s &= 2; \end{aligned} \tag{5-24}$$

o con el criterio

$$\begin{aligned} m + n &= 0, \\ r + s &= 0. \end{aligned} \tag{5-25}$$

De tal forma que para construir elecciones de (5 – 22) y (5 – 23) que nos lleven a la métrica (2 – 5) deberemos de seleccionar una clasificación $q = (m, n, r, s)$ ya sea por el criterio (5 – 23) o por el criterio (5 – 24); para finalmente resolver un sistema de ecuaciones que consta de combinaciones de las constantes Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c .

El sistema de más fácil solución es aquel que corresponde a $q = (1, 1, 1, 1)$. Este sistema sólo contiene elementos de los paréntesis $[X^c, Y_c]_{E^a I^b}$; mientras que el resto son idénticamente cero. Las siguiente clasificación de interés corresponden a $q = (m, n, 1, 1)$; para esta clasificación las

ecuaciones que provienen del paréntesis $[X^c, Y_c]_{I^a I^b}$ son idénticamente cero; lo cual representa una reducción importante en el número de ecuaciones a resolver.

5.4.2. Como encontrar difeomorfismos utilizando la solución general

A este punto daremos un algoritmo que permite la elección de difeomorfismos correctos que solucionen las métricas de la GTD. Así mismo daremos un ejemplo de su uso.

La construcción de soluciones generales se puede resumir en el siguiente algoritmo:

1. Selección de constantes Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c en (5 – 5) de tal manera que las potencias asociadas en (5 – 22) y (5 – 23) correspondan a las $\xi_{ab} E^a I^b$ de la métrica deseada.
2. Realizar el cálculo de los paréntesis (5 – 4) para los coeficientes Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c seleccionados en el paso 1.
3. Determinar el vector de clasificación $q = (m, n, r, s)$ de tal manera que las ecuaciones encontradas en el paso 1 y 2 sean consistentes o puedan reducirse.

5.4.3. Como generar una solución para G^{III}

El ejemplo seleccionado es el caso $h_{ab} = \begin{pmatrix} E^1 I^1 & 0 \\ 0 & E^2 I^2 \end{pmatrix}$ de tal manera que $\xi_{22} = \xi_{11} = 1$; cero para los demás casos.

Los coeficientes que nos regresan la forma deseada en (5 – 4) son: $\Pi_{1111}^1, \Psi_{1111}^1, \Pi_{1111}^2$ y Ψ_{1111}^2 para la parte $E^1 I^1$ y $\Pi_{2222}^1, \Psi_{2222}^1, \Pi_{2222}^2$ y Ψ_{2222}^2 que corresponden a $E^2 I^2$; de tal forma que

$$[X^c, Y_c]_{E^1 E^1} = \omega_{11} \Xi_{11} E^1 I^1 + \omega_{ab}^1 \Xi_{cd} E^a I^b E^c I^d \quad (5-26)$$

$$[X^c, Y_c]_{E^2 E^2} = \omega_{22} \Xi_{22} E^2 I^2 + \omega_{ab}^2 \Xi_{cd} E^a I^b E^c I^d \quad (5-27)$$

con,

$$\omega_{22} = \omega_{11} = (m+n)(r+s) - (m+n-2)(r+s-2), \quad (5-28)$$

$$\Xi_{11} = \Pi_{1111}^1 \Psi_{1111}^1 + \Pi_{1111}^2 \Psi_{1111}^2, \quad (5-29)$$

$$\Xi_{22} = \Pi_{2222}^1 \Psi_{2222}^1 + \Pi_{2222}^2 \Psi_{2222}^2, \quad (5-30)$$

y la parte $\Xi_{cd} = \Xi_{cd}(\Pi_{abcd}^c, \Psi_{abcd}^c) \neq \Xi_{11}$, es decir la combinación especial Ξ_{11} no aparece en ningún otra Ξ_{cd} . De igual manera las potencias a, b, c y d son tales que ninguna de sus combinaciones nos da la $E^1 I^1$ o el $E^2 I^2$. Para el paso 2 del algoritmo debemos utilizar $\Pi_{1111}^1, \Psi_{1111}^1, \Pi_{1111}^2$ y Ψ_{1111}^2 en (5-4); el resultado para $[X^c, Y_c]_{E^1 E^1}$ es,

$$[X^c, Y_c]_{E^1 E^1} = \theta_{11} \Xi_{11} (I^1)^2 + \theta_{ab} \Xi_{cd} E^a I^b E^c I^d \quad (5-31)$$

con,

$$\theta_{11} = -(m+n)(m+n-2); \quad (5-32)$$

mientras que para $[X^c, Y_c]_{I^1 I^1}$ tenemos

$$[X^c, Y_c]_{I^1 I^1} = \zeta_{11} \Xi_{11} (E^1)^2 + \zeta_{ab} \Xi_{cd} E^a I^b E^c I^d, \quad (5-33)$$

con

$$\zeta_{11} = -(r+s)(r+s-2). \quad (5-34)$$

Si ahora tomamos $\Pi_{2222}^1, \Psi_{2222}^1, \Pi_{2222}^2$ y Ψ_{2222}^2 en (5-4); el resultado para $[X^c, Y_c]_{E^2 E^2}$ es,

$$[X^c, Y_c]_{E^2 E^2} = \theta_{22} \Xi_{22} (I^2)^2 + \theta_{ab} \Xi_{cd} E^a I^b E^c I^d \quad (5-35)$$

que le corresponde,

$$\theta_{22} = -(m+n)(m+n-2); \quad (5-36)$$

Finalmente para $[X^c, Y_c]_{I^2 I^2}$ se obtiene,

$$[X^c, Y_c]_{I^2 I^2} = \zeta_{22} \Xi_{22} (E^2)^2 + \zeta_{ab} \Xi_{cd} E^a I^b E^c I^d, \quad (5-37)$$

cuyo coeficiente

$$\zeta_{22} = -(r + s)(r + s - 2). \quad (5-38)$$

Para completar el paso tres debemos de generar una vista completa del subsistema de ecuaciones que estamos estudiando:

$$\omega_{11} \Xi_{11} E^1 I^1 = \xi_{11} \quad (5-39)$$

$$\omega_{22} \Xi_{22} E^2 I^2 = \xi_{22} \quad (5-40)$$

$$\theta_{11} \Xi_{11} (I^1)^2 = 0 \quad (5-41)$$

$$\zeta_{11} \Xi_{11} (E^1)^2 = 0 \quad (5-42)$$

$$\theta_{22} \Xi_{22} (I^2)^2 = 0 \quad (5-43)$$

$$\zeta_{22} \Xi_{22} (E^2)^2 = 0 \quad (5-44)$$

una simple inspección nos muestra que la elección $\Xi_{11} = \Xi_{22} = 0$ no es consistente; de tal forma que deberemos tener $\theta_{11} = \zeta_{11} = \theta_{22} = \zeta_{22} = 0$. La elección de los coeficientes que mantienen la consistencia nos da los criterios (5 – 24) y (5 – 25). De esta forma hemos mostrando que este caso particular de la métrica (2 – 5) cumple con la aseveración antes mencionada.

5.5. Difeomorfismo χ con $X^a = X^a(E^a)$ y $Y^a = Y^a(I^a)$

En esta sección presentamos un difeomorfismos nos permiten combinar las condiciones de integrabilidad (4 – 10) y (4 – 11) con las ecuaciones del difeomorfismo (5 – 4) y (5 – 5). Analizamos los difeomorfismo del tipo

$$X^a = X^a(E^a) \quad (5-45)$$

$$Y^a = Y^a(I^a), \quad (5-46)$$

a partir de ellos presentamos un conjunto unificado de ecuaciones que permite integrar F . El contenido principal de esta sección está dada por la siguiente afirmación.

AFIRMACIÓN 3: Sea $\chi : T \longrightarrow T$ un difeomorfismo de $\chi : \{Z^A\} \longrightarrow \{Z^{\tilde{A}}\}$ con $Z^{\tilde{A}} = \{F, X^a, Y^a\}$ y $Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\}$ donde $a \in \{1, \dots, n\}$ con $X^a = X^a(E^a)$ y $Y^a = Y^a(I^a)$. Tomando la 1-forma de contacto en las coordenadas Z^A como $\Theta = d\Phi - I_a dE^a$ y la 1-forma de contacto $\tilde{\Theta} = dF - f_a Y_a dX^a$ con $f_1 = f_1(X^1, Y^1)$, $f_2 = f_2(X^2, Y^2)$, ..., $f_n = f_n(X^n, Y^n)$ en las coordenadas $Z^{\tilde{A}}$; construyamos la métrica $\tilde{G} = \tilde{\Theta} \otimes \tilde{\Theta} + \delta_{ab} dX^a \otimes dY^b$ y la métrica $G = \Theta \otimes \Theta + h_{ab} dE^a \otimes dI^b$, con $h_{ab} = h_{ab}(E^a, I^a)$ diagonal e invariante de Legendre. Entonces las ecuaciones del difeomorfismo χ se cumplen si:

$$(X^a, Y^a)_{E^a I^b} = h_{ab} \quad (5-47)$$

con:

$$(X^a, X^b)_{Z^A Z^B} = \frac{\partial X^a}{\partial Z^A} \frac{\partial X^b}{\partial Z^B} \quad (5-48)$$

5.5.1. Reducción de la condición de integrabilidad y las ecuaciones del difeomorfismo para χ con $X^a = X^a(E^a)$ y $Y^a = Y^a(I^a)$

La reducción es una aplicación directa del difeomorfismo (5-45) y (5-46) con la suposición de que $f_0 = 1$ y $f_a = f_a(X^a, Y^a)$ ⁵. Aplicando directamente a (4-10)-(4-11) :

$$f_c \{X^c, Y^c\}_{\Phi E^b} = f_c \{X^c, Y^c\}_{\Phi I^b} = 0; \quad (5-49)$$

debido a que $\frac{\partial Y^c}{\partial \Phi} = \frac{\partial X^c}{\partial \Phi} = 0$. La otra parte,

$$f_c \{X^c, Y^c\}_{E^a E^b} = f_c \{X^c, Y^c\}_{I^a I^b} = 0, \quad (5-50)$$

⁵Como ejemplo, para $n = 1$ nos indica

$$\begin{aligned} f_1 &= f_1(X^1, Y^1), \\ X^1 &= X^1(E^1), \\ Y^1 &= Y^1(I^1). \end{aligned}$$

se reducen debido a $\frac{\partial Y^c}{\partial E^a} = \frac{\partial X^c}{\partial I^a} = 0$. Finalmente tendremos:

$$f_c \{X^c, Y_c\}_{E^a I^b} = f_a \frac{\partial X^a}{\partial E^a} \frac{\partial Y^a}{\partial I^a} = f_a \left(\frac{\partial X^a}{\partial E^a} \frac{\partial Y^a}{\partial I^a} \right) \quad (5-51)$$

Este mismo escenario lo tenemos para las relaciones (5 – 4)-(5 – 5), de tal manera que

$$[X^c, Y_c]_{\Phi\Phi} = [X^c, Y_c]_{\Phi E^a} = [X^c, Y_c]_{\Phi I^a} = [X^c, Y_c]_{E^a E^b} = [X^c, Y_c]_{I^a I^b} = 0, \quad (5-52)$$

donde las primeras tres se deben a que las X^a y Y^a no dependen de Φ ; las siguientes dos se cancelan debido a la dependencia de las X^a y las Y^a . La ecuacion restante se reduce a

$$[X^c, Y_c]_{E^a I^b} = \frac{\partial X^a}{\partial E^a} \frac{\partial Y^a}{\partial I^a} = h_{aa} \quad (5-53)$$

Utilizando la condición de integrabilidad (5 – 51) con la ecuación del difeomorfismo (5 – 53), llegamos a una relación entre los componentes de la métrica y las f_a :

$$h_{ab} = \frac{\delta_{ab}}{f_b}. \quad (5-54)$$

5.5.2. Aplicación a la métrica G^{III}

Utilizando la afirmación 3 y resolviendo sus ecuaciones (5 – 47), podemos encontrar la transformación correcta para G^{III} . Dicho difeomorfismo relaciona las métricas G y \tilde{G} ; preservando el contactomorfismo y permitiendonos integrar F .

RESULTADO 1: Sea $\chi : T \longrightarrow T$ un difeomorfismo de $\chi : \{Z^A\} \longrightarrow \{Z^{\tilde{A}}\}$ con $Z^{\tilde{A}} = \{F, X^a, Y^a\}$ y $Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\}$ donde $a \in \{1, \dots, n\}$; dado por

$$F = \frac{\Phi}{2k+2} \quad (5-55)$$

$$X^a = \frac{(E^a)^{2k+2}}{2k+2} \quad (5-56)$$

$$Y^a = \frac{(I^a)^{2k+2}}{2k+2}. \quad (5-57)$$

Entonces χ transforma la métrica

$$G^{III} = \Theta \otimes \Theta + \delta_{ab} \left(E^a I^b \right)^{2k+1} dE^a \otimes dI^b \quad (5-58)$$

a la métrica

$$\tilde{G} = \tilde{\Theta} \otimes \tilde{\Theta} + \delta_{ab} dX^a \otimes dY^b; \quad (5-59)$$

donde

$$\Theta = d\Phi - I_a dE^a \quad (5-60)$$

y

$$\tilde{\Theta} = dF - f_a Y_a dX^a \quad (5-61)$$

con

$$f_a = \frac{1}{\left[(2k+2)^2 X^a Y^a \right]^{\frac{2k+1}{2k+2}}}. \quad (5-62)$$

Demostración de la relación entre \tilde{G} y G^{III}

A partir de la afirmación 3, utilizamos en ella la definición de la métrica (5 – 58), de tal forma que $h_{ab} = \delta_{ab} \left(E^a I^b \right)^{2k+1}$. La ecuación (5 – 47) es específicamente,

$$(X^a, Y^a)_{E^a I^a} = \frac{\partial X^a}{\partial E^a} \frac{\partial Y^a}{\partial I^a} = (E^a I^a)^{2k+1}. \quad (5-63)$$

donde aclaramos que no hay suma para índices repetidos.

La solución a (5 – 63) es dada por

$$X^a = \frac{(E^a)^{2k+2}}{2k+2} \quad (5-64)$$

$$Y^a = \frac{(I^a)^{2k+2}}{2k+2}. \quad (5-65)$$

Por otro lado tenemos la relación (5 – 54), que para esta métrica adquiere la forma

$$\frac{1}{f_a} = (E^a I^a)^{2k+1}; \quad (5-66)$$

Utilizando el difeomorfismo (5 – 56) y (5 – 57) podemos expresar estas funciones como:

$$f_a = \frac{1}{\left[(2k+2)^2 X^a Y^a \right]^{\frac{2k+1}{2k+2}}}. \quad (5-67)$$

Finalmente podemos integrar F a partir de la preservación de la forma de contacto,

$$\tilde{\Theta} = dF - \frac{I_a}{2k+2} dE^a \quad (5-68)$$

$$= \frac{1}{2k+2} (d\Phi - I_a dE^a) \quad (5-69)$$

de donde seleccionamos

$$F = \frac{\Phi}{2k+2}. \quad (5-70)$$

Capítulo 6

Conclusiones

Revisiones sobre la teoría de fluctuaciones termodinámicas que incluyen los conceptos de covarianza y consistencia han sido realizados al incorporar el lenguaje de geometría de Riemann a ella (Ruppeiner [1995]). En otra línea de pensamiento, la incorporación directa de las fluctuaciones a los postulados de la termodinámica ha sido presentada por los trabajos de (Mishin [2015]). En nuestro trabajo seguimos ambas líneas de acción al incorporar las métricas de la GTD a la teoría de fluctuaciones.

Nuestro trabajo muestra principalmente la relación entre las métricas (2 – 7) y (4 – 8) a partir de un contactomorfismo χ que relaciona las estructuras de contacto definidas por las 1– formas (2 – 1) y (4 – 9). Encontramos que las soluciones generales a las ecuaciones del difeomorfismo χ

$$X^c = \Pi_{abcd}^c (E^a)^m (E^b)^n (I^e)^{(1-r)} (I^d)^{(1-s)} + \alpha^c \Phi + \beta_d^c E^d + \psi_d^c I^d, \quad (6-1)$$

$$Y^c = \Psi_{abcd}^c (E^a)^{(1-m)} (E^b)^{(1-n)} (I^e)^r (I^d)^s + \delta^c \Phi + \varepsilon_d^c E^d + \gamma_d^c I^d; \quad (6-2)$$

pueden ser clasificadas acorde a las potencias m , n , r y s . Dicha clasificación es utilizada dentro de un algoritmo de solución para obtener un sistema de ecuaciones en la que los coeficientes Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c correspondan a aquellos de un tipo particular de las métricas de la GTD; generando una solución consistente que permita integrar la función F a partir de las condiciones de integrabilidad (4 – 10) y (4 – 11).

Para incorporar una estructura de Riemann a la teoría de fluctuaciones Gaussianas, notamos que la métrica (4 – 8) se le puede asociar la métrica proyectada

$$\tilde{g} = \frac{1}{2} \left[(f_0 - f_a)(f_0 - f_b) \frac{\partial F}{\partial X^a} \frac{\partial F}{\partial X^b} + \frac{\partial^2 F}{\partial X^a \partial X^b} \right] dX^a dX^b, \quad (6-3)$$

suponiendo que se cumple la primera ley de la termodinámica $\tilde{\varphi}^*(dF - Y_a dX^a) = 0$ en el espacio de equilibrio \mathcal{F} . Es claro que los encajes φ y $\tilde{\varphi}$ no necesariamente deben ser idénticos. Concluimos que la GTD exige que la mera función F sea un potencial termodinámico con un extremo que corresponde a la segunda ley de la termodinámica. La condición anterior reduce la métrica (6 – 3) a

$$\tilde{g} = \frac{\partial^2 F}{\partial X^a \partial X^b} dX^a dX^b, \quad (6-4)$$

que es una métrica Hessiana. Podemos utilizar la relación (6 – 4) directamente en la teoría de fluctuaciones Gaussianas debido a que ella cumple con los requerimientos matemáticas necesarias.

Vemos entonces que el contexto físico debe ser incorporado dentro de la estructura como un límite de aplicabilidad. Esto es similar a el límite establecido para la teoría de fluctuaciones Gaussianas al restringirse a aquellas que no sean fluctuaciones cuánticas. Concluimos:

La interpretación física se traduce a encontrar estos límites, para lo cual requerimos de información para la función F .

A este punto recordamos que una expresión para F puede ser obtenida via el difeomorfismo χ . En particular nosotros la hemos encontrado para la métrica G^{III}

$$F = \frac{\Phi}{2k + 2}; \quad (6-5)$$

junto con las relaciones

$$X^a = \frac{(E^a)^{2k+2}}{2k + 2}; \quad (6-6)$$

$$Y^a = \frac{(I^a)^{2k+2}}{2k + 2}. \quad (6-7)$$

Es de esta manera que con las herramientas desarrolladas en este trabajo hemos encontrado

una forma particular de F .

En conclusion, *la posibilidad de encontrar soluciones nos motiva a examinar las diferentes métricas de la GTD con las herramientas propuestas en esta tesis. Tales nuevas soluciones nos llevarian a encontrar relaciones físicas claras a partir de la forma de los difeomorfismos teniendo en mente la conexión con la teoría de fluctuaciones.*

Apéndice A

Propiedades Geométricas del TPS

En este apéndice damos fórmulas para el tensor de Ricci y el escalar de Ricci. Añadimos además una descripción detallada de los objetos geométricos relacionados con cada una de las métricas de la GTD. Los objetos matemáticos a mostrar son: los elementos de cada métrica y su inversa; las ecuaciones geodésicas para cada métrica; fórmulas explícitas para los símbolos de Christoffel de cada métrica. En base a estos objetos mostramos el tensor de Ricci, el escalar de Ricci y el tensor de Einstein para cada una de estas métricas.

Presentamos las diferentes fórmulas en las que basamos los cálculos. En todas ellas utilizamos a g denota la métrica de Riemann. La regla estándar para calcular **los símbolos de Christoffel**

Γ_{ab}^c

$$\Gamma_{ab}^c = \frac{1}{2} g^{cd} (\partial_b g_{da} + \partial_a g_{bd} - \partial_d g_{ab}). \quad (\text{A-1})$$

Para calcular **el tensor de Ricci** R_{ab} utilizamos estos símbolos,

$$R_{ab} = \partial_d \Gamma_{ab}^d - \nabla_b (\partial_a (\log \sqrt{g})) - \Gamma_{be}^d \Gamma_{da}^e. \quad (\text{A-2})$$

El escalar de curvatura R es calculado utilizando contracción con la métrica.

$$R = g^{ab} R_{ab}. \quad (\text{A-3})$$

Las ecuaciones geodésicas pueden ser calculadas de manera directa utilizando **el "Lagrangian"** L_G

asociado a la métrica

$$L_G = L_1 = \left(\dot{\Phi} - \delta_{ab} I^a \dot{E}^b \right)^2 + h_{cd} \dot{E}^c \dot{I}^d, \quad (\text{A-4})$$

y las ecuaciones de Euler -Lagrange

$$\frac{d}{d\lambda} \left(\frac{\partial L_G}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L_G}{\partial q} = 0; \quad (\text{A-5})$$

el punto denota diferenciación con respecto de un parámetro afín λ y q son las coordenadas, en este caso $q \in \{\Phi, I^a, E^a\}$ con $a \in \{1, \dots, n\}$. Finalmente la formula utilizada para el **tensor de Einstein** E ,

$$E_{ab} = R_{ab} - \frac{1}{2} g_{ab} R. \quad (\text{A-6})$$

A.1. Objetos de la métrica G^{III}

La métrica con la que trabajamos es

$$G^{III} = \left(d\Phi - \delta_{cd} I^c dE^d \right)^2 + \Lambda \delta_{ab} \left(E^a I^b \right)^{2k+1} dE^a dI^b, \quad (\text{A-7})$$

donde Λ es una constante y $k \in \mathbb{Z}$.

A.1.1. Componentes de la métrica G^{III}

Los componentes de la métrica están dados por:

$$G_{\Phi\Phi}^{III} = 1, \quad (\text{A-8})$$

$$G_{\Phi E^a}^{III} = -I^a, \quad (\text{A-9})$$

$$G_{E^a E^b}^{III} = I^a I^b, \quad (\text{A-10})$$

$$G_{E^a I^b}^{III} = \frac{\Lambda}{2} \delta_{ab} \left(E^a I^b \right)^{2k+1} = 2\Gamma_a^{-1} \delta^{ab}. \text{ (no suma)} \quad (\text{A-11})$$

Utilizandoles podemos inferir el determinate,

$$\det G^{III} = (-1)^n \left[\left(\frac{\Lambda}{2} \right)^n \prod_{\sigma} (E^{\sigma} I^{\sigma})^{2k+1} \right]^2 = \left[\left(-\frac{\Lambda}{2} \right)^n (\Pi_i^n E^i I^i)^{2k+1} \right]^2. \quad (\text{A-12})$$

Además tambien podemos escribir los componentes de la métrica inversa:

$$(G^{III})^{\Phi\Phi} = 1, \quad (\text{A-13})$$

$$(G^{III})^{\Phi I^a} = \frac{2}{\Lambda} \frac{I^a}{(E^a I^a)^{2k+1}} = 2I^a \Gamma_a, \quad (\text{no suma}) \quad (\text{A-14})$$

$$(G^{III})^{E^a I^b} = \frac{2}{\Lambda} \delta_{ab} \frac{1}{(E^a I^b)^{2k+1}} = 2\delta_{ab} \Gamma_a. \quad (\text{no suma}) \quad (\text{A-15})$$

A.1.2. Ecuaciones geodésicas de la métrica G^{III}

Las ecuaciones geodésicas para esta métrica son:

$$\dot{\Phi} - \delta_{cd} I^c \dot{E}^d = C_{\Phi}, \quad (\text{A-16})$$

$$\Lambda (I^c)^{2k+1} \frac{d}{d\lambda} \left[(E^c)^{2k+1} \dot{E}^c \right] + 2C_{\Phi} \dot{E}^c = 0, \quad (\text{A-17})$$

$$\Lambda (E^c)^{2k+1} \frac{d}{d\lambda} \left[(I^c)^{2k+1} \dot{I}^c \right] - 2C_{\Phi} \dot{I}^c = 0, \quad (\text{A-18})$$

recordamos que el punto denota diferenciación con respecto a el parámetro afín λ y C_{Φ} es una constante. Las soluciones paramétricas con respecto a λ son:

$$E^c = E_0^c \exp\left(-\frac{\lambda}{\lambda_0^c}\right), \quad (\text{A-19})$$

$$I^c = I_0^c \exp\left(\frac{\lambda}{\lambda_0^c}\right), \quad (\text{A-20})$$

$$\Phi = \lambda_{\Phi} \lambda + \lambda_0. \quad (\text{A-21})$$

Las constantes definidas en las ecuaciones previas están dadas por:

$$\lambda_0^c = \frac{\Lambda(k+1)}{C_\Phi} (E_0^c I_0^c)^{2k+1}, \quad (\text{A-22})$$

$$\lambda_\Phi = C_\Phi - \sum_c \frac{E_0^c I_0^c}{\lambda_0^c}. \quad (\text{A-23})$$

Utilizando las ecuaciones (A-19) – (A-21), tambien podemos encontrar las primeras integrales

$$C_\Phi = \dot{\Phi} - \delta_{cd} I^c \dot{E}^d \quad (\text{A-24})$$

$$C_c = (I^c E^c)^{2k+1} \dot{E}^c \dot{I}^c = - \left[\frac{(E_0^c I_0^c)^{k+1}}{\lambda_0^c} \right]^2 \quad (\text{A-25})$$

A.1.3. Símbolos de Christoffel para la métrica G^{III}

En este caso los símbolos son:

$$\Gamma_{\Phi E^b}^{E^b} = \frac{1}{\Lambda (E^b I^b)^{2k+1}} = \Gamma_b \quad (\text{A-26})$$

$$\Gamma_{E^a E^b}^{E^b} = \left[\frac{2k+1}{E^a} \delta^{ab} - 2I_a \Gamma_b \right] \quad (\text{A-27})$$

$$\Gamma_{I^a I^b}^{I^b} = \frac{2k+1}{I^a} \delta^{ab} \quad (\text{A-28})$$

$$\Gamma_{E^a I^b}^{I^b} = I^a \Gamma_b \quad (\text{A-29})$$

$$\Gamma_{\Phi I^b}^{I^b} = -\Gamma_b \quad (\text{A-30})$$

$$\Gamma_{I^a E^b}^{\Phi} = -\frac{1}{2} \delta^{ab} \quad (\text{A-31})$$

$$\Gamma_{E^a E^b}^{\Phi} = \left[I^a \frac{2k+1}{E^b} \delta^{ab} - I^a I^a (\Gamma_a + \Gamma_b) \right] \quad (\text{no suma}) \quad (\text{A-32})$$

$$\Gamma_{\Phi E^b}^{\Phi} = I^b \Gamma_b. \quad (\text{no suma}) \quad (\text{A-33})$$

A.1.4. Tensor de Ricci para la métrica G^{III}

Los componentes para el tensor son:

$$R_{\Phi\Phi} = -R \quad (\text{A-34})$$

$$R_{\Phi I^b} = -\frac{2k+1}{I^b}\Gamma_b \quad (\text{A-35})$$

$$R_{\Phi E^b} = \frac{2k+1}{E^b}\Gamma_b + I^b R \quad (\text{A-36})$$

$$R_{I^a I^b} = 0 \quad (\text{A-37})$$

$$R_{E^a I^b} = -\Gamma_a \delta^{ab} + I^a \frac{2k+1}{I^b}\Gamma_b \quad (\text{A-38})$$

$$R_{E^a E^b} = -I_a I_b \left[\frac{2k+1}{I^a E^a}\Gamma_a + \frac{2k+1}{I^b E^b}\Gamma_b + R \right] \quad (\text{A-39})$$

donde R es el escalar de curvatura que definiremos en la siguiente sección.

A.1.5. Escalar de Ricci para la métrica G^{III}

El escalar de curvatura está dado por:

$$R = -R_{\Phi\Phi} = -2 \sum_d^n \Gamma_d^2 \quad (\text{A-40})$$

A.1.6. Tensor de Einstein para la métrica G^{III}

Con los componentes de ricci y la métrica podemos encontrar las ecuaciones de Einstein:

$$E_{\Phi\Phi}^{III} = -\frac{3}{2}R \quad (\text{A-41})$$

$$E_{\Phi I^b}^{III} = -\frac{2k+1}{I^b}\Gamma_b \quad (\text{A-42})$$

$$E_{\Phi E^b}^{III} = \left[\frac{2k+1}{E^b}\Gamma_b + \frac{3}{2}I^b R \right] \quad (\text{A-43})$$

$$G_{I^a I^b}^E = 0 \quad (\text{A-44})$$

$$E_{E^a I^b}^{III} = \left[-(\Gamma_a + R) \delta^{ab} + I^a \frac{2k+1}{I^b}\Gamma_b \right] \quad (\text{A-45})$$

$$E_{E^a E^b}^{III} = -I_a I_b \left[\frac{2k+1}{I^a E^a}\Gamma_a + \frac{2k+1}{I^b E^b}\Gamma_b + \frac{3}{2}R \right] \quad (\text{A-46})$$

A.2. Objetos de la métrica G^I

La métrica con G^I es invariante ante transformaciones totales de Legendre. Ha sido utilizada para trabajar con agujeros negros en GTD. La métrica es definida como:

$$G^I = \left(d\Phi^2 - \delta_{ab} I^a dE^b \right)^2 + \Gamma \left(\delta_{eh} dE^e dI^h \right), \quad (\text{A-47})$$

donde $\Gamma = (\delta_{cd} E^c I^d)$.

A.2.1. Componentes de la métrica G^I

Desde la definición de la métrica podemos observar que algunos de sus componentes son iguales a los de la métrica G^{III} . Los componentes están dados por las siguientes relaciones:

$$G^I_{\Phi\Phi} = 1 \quad (\text{A-48})$$

$$G^I_{\Phi E^a} = -I^a \quad (\text{A-49})$$

$$G^I_{E^a E^b} = I^a I^b \quad (\text{A-50})$$

$$G^I_{E^a I^b} = \frac{\Gamma}{2} \delta_{ab} \quad (\text{A-51})$$

De ellas podemos inferir el determinante,

$$\det G = (-1)^n (\Gamma)^{2n}. \quad (\text{A-52})$$

Además también podemos escribir los componentes de la métrica inversa:

$$(G^I)^{\Phi\Phi} = 1 \quad (\text{A-53})$$

$$(G^I)^{\Phi I^a} = 2 \frac{I^a}{\Gamma} \quad (\text{A-54})$$

$$(G^I)^{E^a I^b} = 2 \frac{\delta_{ab}}{\Gamma}. \quad (\text{A-55})$$

A.2.2. Ecuaciones geodésicas de la métrica G^I

Las ecuaciones geodésicas para esta métrica son:

$$\dot{\Phi} - \delta_{ab} I^a \dot{E}^b = \frac{C_\Phi}{2} \quad (\text{A-56})$$

$$\frac{d}{d\lambda} (\Gamma \dot{E}^n) + c_\Phi \dot{E}^n - E^n (\delta_{eh} \dot{E}^e \dot{I}^h) = 0 \quad (\text{A-57})$$

$$\frac{d}{d\lambda} (\Gamma \dot{I}^n) - c_\Phi \dot{I}^n - I^n (\delta_{eh} \dot{E}^e \dot{I}^h) = 0, \quad (\text{A-58})$$

A.2.3. Símbolos de Christoffel para la métrica G^I

En este caso los símbolos son:

$$\Gamma_{\Phi E^b}^{E^c} = \frac{\delta_{cb}}{\Gamma} \quad (\text{A-59})$$

$$\Gamma_{E^a E^b}^{E^c} = -\frac{1}{2\Gamma} (I^b \delta_{ac} + I^a \delta_{cb}) \quad (\text{A-60})$$

$$\Gamma_{E^a I^b}^{E^c} = \frac{1}{2\Gamma} (E^b \delta_{ca} - E^c \delta_{ab}) \quad (\text{A-61})$$

$$\Gamma_{\Phi I^b}^{I^c} = -\frac{\delta_{cb}}{\Gamma} \quad (\text{A-62})$$

$$\Gamma_{E^a I^b}^{I^c} = \frac{1}{2\Gamma} (3I^a \delta_{bc} - I^c \delta_{ab}) \quad (\text{A-63})$$

$$\Gamma_{I^a I^b}^{I^c} = \frac{1}{2\Gamma} (E^b \delta_{ac} + E^a \delta_{bc}) \quad (\text{A-64})$$

$$\Gamma_{\Phi E^b}^{\Phi} = \frac{I^b}{\Gamma} \quad (\text{A-65})$$

$$\Gamma_{E^a I^b}^{\Phi} = \frac{I^a E^b}{2\Gamma} - \delta_{ab} \quad (\text{A-66})$$

$$\Gamma_{E^a E^b}^{\Phi} = -\frac{I^b I^a}{\Gamma} \quad (\text{A-67})$$

A.2.4. Tensor de Ricci para la métrica G^I

Los componentes para el tensor son:

$$R_{\Phi\Phi} = -2n \left(\frac{1}{\Gamma} \right)^2 \quad (\text{A-68})$$

$$R_{\Phi E^b} = (3n - 2) I^b \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-69})$$

$$R_{\Phi I^b} = -(n - 2) \frac{E^b}{\Gamma^2} \quad (\text{A-70})$$

$$R_{E^a I^b} = + \left((4 - 3n) \Gamma \delta_{ab} + \frac{1}{2} (5n - 7) E^b I^a \right) \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-71})$$

$$R_{E^a E^b} = -\frac{5}{2} (n - 1) \frac{I^a I^b}{\Gamma^2} \quad (\text{A-72})$$

$$R_{I^a I^b} = \frac{3}{2} (n - 1) E^b E^a \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-73})$$

A.2.5. Escalar de Ricci para la métrica G^I

El escalar de curvatura está dado por:

$$R = -2 [n + (3n - 1) (2n - 3)] \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-74})$$

A.2.6. Tensor de Einstein para la métrica G^{III}

Con los componentes de ricci y la métrica podemos encontrar las ecuaciones de Eistein:

$$E_{\Phi\Phi}^I = r_1 \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-75})$$

$$E_{\Phi E^b}^I = -r_2 I^b \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-76})$$

$$E_{\Phi I^b}^I = -r_3 E^b \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-77})$$

$$E_{E^a E^b}^I = r_4 I^a I^b \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-78})$$

$$E_{E^a I^b}^I = \left(r_6 \delta_{ab} \Gamma + r_5 E^b I^a \right) \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-79})$$

$$E_{I^a I^b}^I = r_7 E^a E^b \frac{1}{\Gamma^2}, \quad (\text{A-80})$$

donde utilizamos los siguiente polinómios:

$$r_1 = -n + (3n - 1)(2n - 3) \quad (\text{A-81})$$

$$r_2 = (2n - 1)(3n - 5) \quad (\text{A-82})$$

$$r_3 = (n - 2) \quad (\text{A-83})$$

$$r_4 = \frac{1}{2}(2n + 5 + 3(4n - 1)(n - 2)) \quad (\text{A-84})$$

$$r_5 = \frac{1}{2}(5n - 7) \quad (\text{A-85})$$

$$r_6 = \frac{1}{2}(n + (n - 1)(6n - 11)) \quad (\text{A-86})$$

$$r_7 = \frac{3}{2}(n - 1) \quad (\text{A-87})$$

A.3. Objetos de la métrica G^{II}

La métrica con la que trabajamos es

$$G^{II} = \left(d\Phi^2 - \delta_{ab} I^a dE^b \right)^2 + \Gamma \left(\eta_{eh} dE^e dI^h \right), \quad (\text{A-88})$$

donde $\Gamma = \delta_{cd} E^c I^d$ y $\Upsilon = \eta_{ab} E^a I^b$.

A.3.1. Componentes de la métrica G^{II}

Los componentes de esta métrica no distan mucho en su definición de aquellos de la métrica G^I , el componente distintivo es $G_{E^a I^b}^{II}$. Los componentes son:

$$G_{\Phi\Phi}^{II} = 1 \quad (\text{A-89})$$

$$G_{\Phi E^a}^{II} = -I^a \quad (\text{A-90})$$

$$G_{E^a E^b}^{II} = I^a I^b \quad (\text{A-91})$$

$$G_{E^a I^b}^{II} = \frac{\Gamma}{2} \eta_{ab} \quad (\text{A-92})$$

Utilizandoles podemos inferir el determinante,

$$\det G = (-1)^n (\Gamma)^{2n}. \quad (\text{A-93})$$

Además tambien podemos escribir los componentes de la métrica inversa:

$$(G^{II})^{\Phi\Phi} = 1 \quad (\text{A-94})$$

$$(G^{II})^{\Phi I^a} = 2 \frac{I^\rho \eta_{a\rho}}{\Gamma} \quad (\text{A-95})$$

$$(G^{II})^{E^a I^b} = 2 \frac{\eta_{ab}}{\Gamma}. \quad (\text{A-96})$$

A.3.2. Ecuaciones geodésicas de la métrica G^{III}

Las ecuaciones geodésicas para esta métrica son:

$$\dot{\Phi} - \delta_{ab} I^a \dot{E}^b = \frac{C_\Phi}{2} \quad (\text{A-97})$$

$$\frac{d}{d\lambda} (\Gamma \dot{E}^c) + \eta_c c_\Phi \dot{E}^c - \eta_c E^c (\eta_{ab} \dot{E}^a \dot{I}^b) = 0 \quad (\text{A-98})$$

$$\frac{d}{d\lambda} (\Gamma \dot{I}^c) - \eta_c c_\Phi \dot{I}^c - \eta_c I^c (\eta_{ab} \dot{E}^a \dot{I}^b) = 0, \quad (\text{A-99})$$

donde C_Φ es una constante y utilizamos la notación η_c para el elemento diagonal de $\eta_{\alpha\beta}$.

A.3.3. Símbolos de Christoffel para la metrica G^{III}

En este caso los símbolos son:

$$\Gamma_{\Phi E^b}^{E^c} = \frac{\eta_{cb}}{\Gamma} \quad (\text{A-100})$$

$$\Gamma_{E^a I^b}^{E^c} = \frac{1}{2\Gamma} \left(E^b \delta_{ca} - E^c \eta_c \eta_{ab} \right) \quad (\text{A-101})$$

$$\Gamma_{E^a E^b}^{E^c} = \frac{1}{2\Gamma} \left[I^b (\delta_{ac} - 2\eta_{ac}) + I^a (\delta_{bc} - 2\eta_{bc}) \right] \quad (\text{A-102})$$

$$\Gamma_{I^a I^b}^{I^c} = \frac{1}{2\Gamma} \left(E^b \delta_{ca} + E^a \delta_{cb} \right) \quad (\text{A-103})$$

$$\Gamma_{E^a I^b}^{I^c} = \frac{1}{2\Gamma} \left[I^a (\delta_{bc} + 2\eta_{cb}) - I^c \eta_c \eta_{ab} \right] \quad (\text{A-104})$$

$$\Gamma_{\Phi I^b}^{I^c} = -\frac{\eta_{cb}}{\Gamma} \quad (\text{A-105})$$

$$\Gamma_{E^a I^b}^{\Phi} = \frac{1}{2\Gamma} \left(E^b I^a - (\Upsilon \eta_{ab} + \Gamma \delta_{ab}) \right) \quad (\text{A-106})$$

$$\Gamma_{\Phi E^b}^{\Phi} = \frac{I^b \eta_b}{\Gamma} \quad (\text{A-107})$$

$$\Gamma_{E^a E^b}^{\Phi} = (1 - \eta_a - \eta_b) I^a I^b \frac{1}{\Gamma} \quad (\text{A-108})$$

A.3.4. Tensor de Ricci para la métrica G^{III}

Los componentes para el tensor son:

$$R_{\Phi\Phi} = -2n \left(\frac{1}{\Gamma} \right)^2 \quad (\text{A-109})$$

$$R_{\Phi E^b} = ((n-2)\eta_b + 2n) \frac{I^b}{\Gamma^2} \quad (\text{A-110})$$

$$R_{\Phi I^b} = -(n-2)\eta_b \frac{E^b}{\Gamma^2} \quad (\text{A-111})$$

$$R_{E^a I^b} = \left(\begin{array}{c} (-\frac{n}{2}(\eta_{ab} + \delta_{ab}) + 2\eta_{ab})\Gamma \\ + (n-2)(E^b I^a \eta_b - \frac{\Upsilon}{2}(3\delta_{ab} + \eta_{ab})) \\ + (n-1)(\frac{3}{2}E^b I^a) \end{array} \right) \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-112})$$

$$R_{E^a E^b} = - \left((n-2)(\eta_a + \eta_b) - \frac{1}{2}(n+3) \right) \frac{I^a I^b}{\Gamma^2} \quad (\text{A-113})$$

$$R_{I^a I^b} = \frac{3}{2}(n-1) E^b E^a \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-114})$$

donde R es el escalar de curvatura que definiremos en la siguiente sección.

A.3.5. Escalar de Ricci para la métrica G^{III}

El escalar de curvatura está dado por:

$$R = -2n(2n-5) \frac{1}{\Gamma^2} + 2[3(n-1) - (n-2)(4n-1)] \frac{\Upsilon}{\Gamma^3} \quad (\text{A-115})$$

A.3.6. Tensor de Einstein para la métrica G^{III}

Con los componentes de ricci y la métrica podemos encontrar las ecuaciones de Einstein:

$$E_{\Phi\Phi}^{II} = \left(\begin{array}{c} n(2n-7)\Gamma \\ + (2n-1)(2n-5)\Upsilon \end{array} \right) \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-116})$$

$$E_{\Phi I^b}^{II} = -(n-2)\eta_b \frac{E^b}{\Gamma^2} \quad (\text{A-117})$$

$$E_{\Phi E^b}^{II} = \left(\begin{array}{c} (n(2n-7) - (n-2)\eta_b)\Gamma \\ + (2n-1)(2n-5)\Upsilon \end{array} \right) \frac{I^b}{\Gamma^3} \quad (\text{A-118})$$

$$E_{E^a I^b}^{II} = + \left(\begin{array}{c} (-\frac{n}{2}(\delta_{ab} - 2(n-3)\eta_{ab}) + 2\eta_{ab})\Gamma \\ + (n-2)(E^b I^a \eta_b - \frac{\Upsilon}{2}(3\delta_{ab} - 2(n-3)\eta_{ab})) \\ + (n-1)(\frac{3}{2}E^b I^a) \end{array} \right) \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-119})$$

$$E_{E^a E^b}^{II} = \left(\begin{array}{c} (2n-1)(2n-5)\Upsilon \\ -\frac{1}{2}(4n+1)(n-3)\Gamma \\ - (n-2)(\eta_a + \eta_b) \end{array} \right) \frac{I^b I^a}{\Gamma^2} \quad (\text{A-120})$$

$$E_{I^a I^b}^{II} = \frac{3}{2}(n-1)E^b E^a \frac{1}{\Gamma^2} \quad (\text{A-121})$$

Apéndice B

Desarrollo de software

La pregunta central en la discusión de la creación de software para cálculos científicos es: ¿Qué lenguaje de programación debo de utilizar? Nosotros nos atrevemos a contestarla diciendo: Aquel lo haga rápidamente. Esta respuesta no es simple de interpretarla, dentro de sí existe una discusión más formal que nos lleva a hablar de la clasificación de los lenguajes de programación en alto y bajo nivel.

B.1. Alto nivel y bajo nivel en los lenguajes de programación

Los lenguajes de alto nivel son aquellos que nos permiten traducir cálculos a algoritmos utilizando la menor cantidad de líneas de código. Ejemplos de lenguajes de alto nivel son: Python, Pearl, Octave, R e IDL. Este tipo de lenguajes son usados en la computación científica con el propósito de hacer exploración de ideas. La sintaxis de ellos permite una interacción entre las ideas y los tipos de datos computacionales que las reflejan; permitiendo un desarrollo flexible en el que la mayor cantidad del tiempo es usado en pensar lo que se codifica que en cómo codificarlo. La comunidad científica favorece el uso de este tipo de lenguajes para comunicar nuevas ideas dado que existen librerías que han traducido las herramientas matemáticas a funcionalidad computacional directa.

En contraste, un lenguaje de programación de bajo nivel nos permite ejecutar cálculos con rapidez utilizando de manera eficiente los recursos de hardware. El ejemplo estándar para lenguajes de bajo nivel es C. El manejo de los recursos de hardware es realizado desde la misma

codificación, de tal manera que permite implementar estrategias para aumentar la velocidad de respuesta tales como: paralelismo, clusterismo o indexación de datos. El nivel de experiencia para la escritura y comprensión de algoritmos debe ser alto más aún para comprender las aplicaciones realizadas por terceros. Tal especialización es la que ha segmentado su uso dentro de la ciencia; haciendo que cada grupo de investigación utilice sus propios algoritmos especializados en los problemas que ellos tratan.

Existen otros lenguajes de programación de tipo intermedio tales como C++ y Java. A comentario, dichos lenguajes son los que han tenido más éxito en el ámbito comercial debido a este mix de habilidades. Hemos expuesto esta última clase de lenguajes debido a que en ellos encontramos las características necesarias para la solución de los sistemas de ecuaciones presentados en esta tesis.

B.2. Problema computacional en esta tesis

Nuestro problema reside en la solución de sistemas (5 – 4), (5 – 5), (4 – 10) y (4 – 11) para el caso $n = 2$. La principal dificultad de dichas soluciones es el número de variables que se tiene que calcular y que no puede ser programado de manera directa; debe de ser flexible para poder calcular las ecuaciones y los casos especiales que se deben de resolver. De manera exacta debe permitir generar las soluciones general (5 – 22) y (5 – 23) como un objeto computacional; procesarse en las ecuaciones (5 – 4), (5 – 5), (4 – 10) y (4 – 11) para crear un conjunto de otros objetos computacionales que relaciones las constantes Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c ; finalmente estas relaciones son las que deberán procesarse para encontrar los valores de ellas que nos permitan establecer las soluciones acordes a las métricas de la GTD.

Para este tipo de problemas computacionales debemos de hacer una mezcla entre las cualidades de un lenguaje de alto nivel con un lenguaje de bajo nivel. Esta mezcla la encontramos en Python a través de la distribución de Anaconda de 64 bits y versión de kernel 3; utilizando las librerías utilizadas numpy y sympy disponibles en formato opensource. La documentación para la instalación y documentación de esta distribución la podemos encontrar en <https://ipython.org/>. En lo que resta de esta apéndice daremos un diagrama del código implementado en la solución de las ecuaciones (5 – 4), (5 – 5), (4 – 10) y (4 – 11). El con-

junto completo de programas y librerías que creamos puede ser encontrado en el repositorio https://github.com/ekhar666/fluctuaciones_GTD. Invitamos a los lectores a que utilicen estas referencias.

B.3. Diagrama de solución y documentación

En esta sección presentamos el diagrama de flujo que implementa el algoritmo de solución para las ecuaciones del difeomorfismo en la figura B.1. Cada uno de los elementos en el diagrama representa una funcionalidad que se encuentra bien especificada dentro de los programas de control. Nosotros creamos varios programas de control para desarrollar diferentes ideas; cada uno de ellos podría especificar un caso particular para la solución general (5 – 22) y (5 – 23) al seleccionar algún vector de clasificación. La funcionalidad está repartida entre varios módulos de funciones que están desarrollados en las bibliotecas `difeomorfismos.py` y `difeomorfismos_solvers.py`.

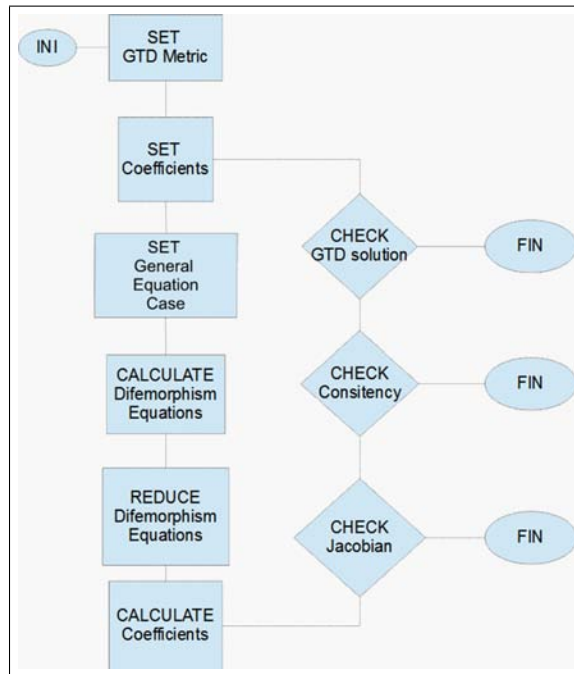


Figura B.1: Diagrama de flujo calculo de ecuaciones de difeomorfismo

La funcionalidad general del diagrama es:

1. **SET GTD Metric:** En esta paso le damos al programa la matriz h_{ab} acorde a algún caso de las métricas de la GTD G^I , G^{II} o G^{III} .

2. **SET Coefficients:** Esta funcionalidad asigna valores a Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c . En el inicio del ciclo de cálculo su valor es algebraico y no un número.
3. **SET General Equation Case:** Los coeficientes Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c son puestos con sus valores en la ecuación general. Esta función requiere que se especifique uno vector de clasificación q . La función es capaz de calcular n sumas de diferentes casos de ecuaciones generales.
4. **CALCULATE Diffeomorphism Equations:** Realiza el cálculo específico de las ecuaciones del difeomorfismo $(5 - 4)$, $(5 - 5)$, $(4 - 10)$ y $(4 - 11)$ con los valores de los coeficientes Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c .
5. **REDUCE Diffeomorphism Equations:** El paso anterior genera un conjunto nuevo de ecuaciones; esta funcionalidad remueve las ecuaciones duplicadas. La funcionalidad es aumentada encontrando no solo ecuaciones duplicadas sino sumas y multiplicaciones por escalar; dichas ecuaciones también son removidas si se cumple con los criterios adecuados.
6. **CALCULATE Coefficients:** Esta es la parte fundamental del algoritmo. Su base es calcular los coeficientes Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c en las ecuaciones $(5 - 4)$ y $(4 - 10)$ que las reduzcan; con la condición de que dichos coeficientes no aparezcan en ninguna de las ecuaciones $(4 - 10)$ y $(4 - 11)$. El resultado son nuevos valores Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c que serán utilizados en los pasos 1 y 2 para encontrar un difeomorfismo más cercano a la solución. Este paso representa el final del ciclo, los siguientes pasos son condiciones de control para validar la solución momentánea o determinar si es una solución final.
7. **CHECK Jacobian:** El primer criterio calcula el Jacobiano del difeomorfismo parcial. Si su valor es 0 termina el ciclo y si es diferente, continua para buscar una solución final.
8. **CHECK Consistency:** Criterio que determina si los coeficientes Π_{abcd}^c y Ψ_{abcd}^c no generan un sistema de ecuaciones incompatibles con la solución buscada para la métrica de la GTD seleccionada. Termina el ciclo si encuentra alguna inconsistencia.
9. **CHECK GTD Solution:** Criterio final que determina si el difeomorfismo parcial es una solución a las ecuaciones del difeomorfismo. El ciclo termina si se ha encontrado una solución y el difeomorfismo parcial es considerado como final.

Bibliografía

- ADLAND, A., KARMA, A., SPATSCHEK, R., BUTA, D., Y ASTA, M. Phase-field-crystal study of grain boundary premelting and shearing in bcc iron. *Phys. Rev. B* **87**(2) (2013)
- ALEXANDERSON, G.L. Y GEIGES, H. Christiaan Huygens and Contact Geometry. *The College Mathematics Journal* **37**(2):159 (2006)
- AMINI, M. Y LAIRD, B.B. Crystal-melt interfacial free energy of binary hard spheres from capillary fluctuations. *Phys. Rev. B* **78**(14) (2008)
- AZREG-AËRNOU, M. On “The conformal metric structure of geometrothermodynamics”: Generalizations. *J. Math. Phys.* **55**(3):033505 (2014)
- BRAVETTI, A., MOMENI, D., MYRZAKULOV, R., Y QUEVEDO, H. Geometrothermodynamics of higher dimensional black holes. *Gen Relativ Gravit* **45**(8):1603–1617 (2013)
- BRAVETTI, A., LOPEZ-MONSALVO, C.S., NETTEL, F., Y QUEVEDO, H. Representation invariant Geometrothermodynamics: Applications to ordinary thermodynamic systems. *Journal of Geometry and Physics* **81**:1–9 (2014)
- CARATHEODORY, C. Untersuchungen uber die Grundlagen der Thermodynamik. *Mathematische Annalen* **67**(3):355–386 (1909)
- DEBENEDETTI, P.G. Fluctuation-based computer calculation of partial molar properties. I. Molecular dynamics simulation of constant volume fluctuations. *The Journal of Chemical Physics* **86**(12):7126 (1987)
- ETNYRE, J. Y GHRIST, R. Contact topology and hydrodynamics: I. Beltrami fields and the Seifert conjecture. *Nonlinearity* **13**(2):441–458 (2000)

- GARCÍA-PELÁEZ, D. Y LÓPEZ-MONSALVO, C.S. Infinitesimal Legendre symmetry in the Geometrothermodynamics programme. *J. Math. Phys.* **55**(8):083515 (2014)
- GIBBS, J. *A Method of Geometrical Representation of the Thermodynamic Properties of Substances by Means of Surfaces*. A Method of Geometrical Representation of the Thermodynamic Properties of Substances by Means of Surfaces. The Academy (1871)
- HERMANN, R. *Geometry, physics, and systems*. Pure and applied mathematics. M. Dekker (1973)
- HOFER, H. Pseudoholomorphic curves in symplectizations with applications to the Weinstein conjecture in dimension three. *Inventiones Mathematicae* **114**(1):515–563 (1993)
- LANDAU, L. Y LIFSHITZ, E. *Física estadística*. Número v. 5 en Ciencias Químicas: Ingeniería química. Reverté (1988)
- LUONGO, O. Y QUEVEDO, H. Cosmological implications of Geometrothermodynamics. En *The Thirteenth Marcel Grossmann Meeting*. World Scientific Pub Co Pte Lt (2015)
- MEYERS, M.T., RICKMAN, J.M., Y DELPH, T.J. The calculation of elastic constants from displacement fluctuations. *J. Appl. Phys.* **98**(6):066106 (2005)
- MISHIN, Y. Thermodynamic theory of equilibrium fluctuations. *Annals of Physics* **363**:48–97 (2015)
- MRUGALA, R. Submanifolds in the thermodynamic phase space. *Reports on Mathematical Physics* **21**(2):197–203 (1985)
- MRUGALA, R., NULTON, J.D., SCHÖN, J.C., Y SALAMON, P. Statistical approach to the geometric structure of thermodynamics. *Phys. Rev. A* **41**:3156–3160 (1990)
- PARRINELLO, M. Strain fluctuations and elastic constants. *The Journal of Chemical Physics* **76**(5):2662 (1982)
- QUEVEDO, H. Geometrothermodynamics. *J. Math. Phys.* **48**(1):013506 (2007)
- QUEVEDO, H. Y RAMIREZ, A. A geometric approach to the thermodynamics of the van der Waals system (2012). 1205.3544

- QUEVEDO, H. Y SÁNCHEZ, A. Geometrothermodynamics of black holes in two dimensions. *Physical Review D* **79**(8) (2009)
- QUEVEDO, H. Y TAPIAS, D. Geometric description of chemical reactions. *Journal of Mathematical Chemistry* **52**(1):141–161 (2013)
- QUEVEDO, H. Y ZALDIVAR, S.A. A geometrothermodynamic approach to ideal quantum gases and Bose-Einstein condensates (2015). 1512.08755
- QUEVEDO, H., SANCHEZ, A., Y VAZQUEZ, A. Thermodynamic systems as bosonic strings (2008a). 0805.4819
- QUEVEDO, H., VAZQUEZ, A., MACIAS, A., LAÏMMERZAHN, C., Y CAMACHO, A. The geometry of thermodynamics. En *AIP Conference Proceedings*. AIP Publishing (2008b)
- QUEVEDO, H., SANCHEZ, A., TAJ, S., Y VAZQUEZ, A. Curvature as a measure of thermodynamic interaction. *J. Korean Phys. Soc.* **57**(31):646 (2010)
- RUPPEINER, G. Thermodynamics: A Riemannian geometric model. *Phys. Rev. A* **20**(4):1608–1613 (1979)
- RUPPEINER, G. Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory. *Reviews of Modern Physics* **67**(3):605–659 (1995)
- SALAMON, P., ANDRESEN, B., NULTON, J., Y KONOPKA, A. The Mathematical Structure of Thermodynamics. En *Principles, Methods, and Concepts*, págs. 207–222. Informa UK Limited (2006)
- WEINHOLD, F. Metric geometry of equilibrium thermodynamics. III. Elementary formal structure of a vector-algebraic representation of equilibrium thermodynamics. *The Journal of Chemical Physics* **63**(6):2488 (1975)