PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
FACULTAD DE MATEMATICAS

ECUACION DE FRAGMENTACION DE SMOLUCHOWSKI EN SISTEMAS CUANTICOS ABIERTOS

JOSE TOMAS NEUMANN SILVA

Tesis presentada a la Comisión integrada por los profesores:

ROLANDO REBOLLEDO

FRANCO FAGNOLA

CLAUDIO FERNANDEZ

Para completar las exigencias del título de
Magíster en Matemáticas

Santiago de Chile, 2008

Índice

1. Introducción

La ecuación de Smoluchowski modela una gran cantidad de fenómenos en áreas como química, física, ingeniería, genética, etc. Consiste en modelar situaciones donde ocurren interacciones de coagulación y fragmentación entre partículas. Para ser más específicos, sea $i \in \mathbb{N}$ y P_i, que denota una partícula de masa i. A medida que pasa el tiempo, las partículas evolucionan dependiendo del grado de interacción entre ellas, pudiendo formar partículas más grandes de masa $i+j$ o más pequeñas de masas j e $i-j$. En el caso de reacciones binarias, se tienen dos tipos de interacciones:

- $P_i + P_j \rightarrow P_{i+j}$ (coagulación)
- $P_i \rightarrow P_{i-j} + P_j$ (fragmentación)

Sea $c_t(i)$ el número de partículas de masa i por unidad de volumen. La expresión $ic_t(i)$ representa la parte de masa consistente en partículas de tamaño i por unidad de volumen. El fenómeno de coagulación ($P_i + P_j \rightarrow P_{i+j}$) se considera proporcional a $c_t(i)c_t(j)$ con constante de proporcionalidad $K_{i,j} = K_{j,i} \geq 0$ llamado núcleo de coagulación. Esta constante representa la tasa a la que se están coagulando las partículas y es simétrica ya que cada vez que se coagula una partícula i con una j, lo estará haciendo una j con una i. Del mismo modo, la fragmentación ($P_i \rightarrow P_{i-j} + P_j$) se considera proporcional a $c_t(i)$ con constante de proporcionalidad $F_{j,i-j} = F_{i-j,j} \geq 0$. Esto representa la tasa en la que ocurre esta reacción. Esta es simétrica ya que cada vez que se generan partículas de tamaño j por fractura de partículas de tamaño i, automaticamente se estarán generando partículas de tamaño $i-j$.

Para el caso discreto, y a través de un análisis de equilibrio de masa, la ecuacion de Smoluchowski se escribe de la siguiente manera:

$$\frac{d}{dt}c_t(i) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{i-1}(K_{j,i-j}c_t(j)c_t(i-j) - F_{j,i-j}c_t(i)) - \sum_{j\in\mathbb{N}^*}(K_{i,j}c_t(i)c_t(j) - F_{i,j}c_t(i+j)) \quad (1)$$

El primer término de la primera sumatoria representa cómo dos partículas se coagulan para formar partículas de masa i. El segundo término de la primera sumatoria representa el fraccionamiento de la partícula de masa i. El primer término de la segunda sumatoria representa cómo la partícula de masa i se coagula con otras. Finalmente, el segundo término de la segunda sumatoria indica cómo partículas de masa mayor se fraccionan para formar partículas de masa i.

En adelante se considerará sólo el fenómeno de fragmentación ($K = 0$). Sea la ecuación de fragmentación pura dada por:

$$\frac{d}{dt}c_t(i) = \sum_{j \in \mathbb{N}^*} F_{i,j} c_t(i+j) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} F_{j,i-j} c_t(i) \tag{2}$$

Esta ecuación modela el comportamiento de fractura a nivel macroscópico.

La fragmentación también puede ocurrir a nivel microscópico, por ejemplo cuando un nucleo atómico se divide en partículas más pequeñas, ya sea en otros nucleos, partículas α, etc. Existen ciertas dificultades cuando se quiere discutir la fragmentación cuántica en términos clásicos, ya que existen interacciones que alteran la dinámica de fractura, por lo que la ecuación (2) no necesariamente explica el fenómeno. Sin embargo, existen casos donde la ecuación de Smoluchowski se ajusta satifactoriamente, tal es el caso de la cromodinámica cuántica que explica las interacciones fuertes fundamentales entre quarks y gluones (cfr. [15]). La fragmentación jet del quark puede ser estudiada bajo la perspectiva de la cromodinámica, como por ejemplo la aniquilación electrón-positrón en hadrones.

En la primera etapa de la aniquilación, bajo los 10^{-24} segundos, un bosón intermediario Z_0 es creado para decaer a un par $q\bar{q}$, seguido por la formación de un tercer jet. Este forma muchos gluones y pares $q\bar{q}$. Esta etapa está bien descrita por la cromodinámica cuántica donde existe una baja constante de acoplamiento efectivo, por lo que puede ser estudiada de manera cuantitativa. En una etapa posterior quarks y gluones se recombinan en hadrones de una manera desconocida y sólo descrita por modelación. Las razones de esto es que el factor de acoplamiento pasa a ser dependiente del tiempo debido a las fluctuaciones cuánticas. En definitiva, los cuantos elementales llamados partones se pueden considerar casi libres a tiempos cortos por lo que el régimen se puede considerar no perturbativo.

A tiempos cortos se puede plantear una ecuación llamada ganancia-pérdida asociada a la cromodinámica cuántica:

$$\frac{d}{d\xi}D_A^B(z) = \sum_C \int_0^1 \frac{dx}{x} P_A^C(x)(D_C^B(z/x) - x^2\delta_A^C D_A^B(z)) \tag{3}$$

Donde D_A^B es la distribución de probabilidad de encontrar un cuanto B en la fragmentación del cuanto inicial A con una fracción z de su momento total. No es el ánimo de esta tesis explicar la derivación de dicha ecuación, pero sí notar que (3) se puede obtener como límite de la ecuación (2) definiendo $t = \xi$, $D(i/A) = c_\xi(i)/i$ y $\frac{P(j/i)}{i} = F_{j,i-j}$ (cfr. [14]).

Al igual que en la ecuación (2), el primer término de la ecuación (3) refleja la ganancia, donde el parton B es obtenido por fragmentación de A con un parton intermediario C. A través de cálculos en la cromodinámica, se puede obtener una predicción específica de los pesos $P_A^C(x)$, lo que permite la solución de (3). También hay una redefinición del parámetro de evolución ξ.

Esta tesis pretende explicar el marco teórico necesario para la apertura del sistema de fragmentación, donde se consideren las perturbaciones que el medio pueda proporcionar al proceso. No se pretende ser exhaustivo en las demostraciones, por lo que se demostrarán sólo las necesarias y más intuitivas y el resto se referenciará. La apertura del sistema puede ser de utilidad para explicar el proceso de fractura cuántico a escalas de tiempo un poco mayores, por lo que el problema puede ser de interés físico.

2. Interpretación probabilista de la ecuación de Smoluchowski

Uno de los objetivos de la física es poder determinar la evolución de los estados de un sistema conociendo las condiciones iniciales y sus leyes. En física cuántica el concepto de estado debe modificarse debido a los métodos de observación. Un estado en un sistema cuántico debe interpretarse como una distribución de probabilidad, por lo que la dinámica se plantea sobre espacios de probabilidades. Más interesante aun es determinar la dinámica sobre los observables, que obviamente guarda relación con la de los estados. Pero esto no ocurre sólo en la cuántica, a menudo se pueden encontrar ecuaciones sobre distribuciones de probabilidad en la física clásica. Tal es el caso de la ecuación de Smoluchowski, que es la ecuación de Kolmogorov para un proceso Markoviano; para esto hay que definir de manera correcta el espacio de probabilidad correspondiente. El objetivo de esta sección es interpretar la ecuación de Smoluchowski como la que determina la evolución de los estados. Se verá que a través de la apertura del sistema puede determinarse la evolución de los observables. Pero esto es sólo una parte de lo que se puede analizar con un sistema abierto, en general este sirve para estudiar la disipación de energía producto del medio.

2.1. Dilatación y ecuaciones de Kolmogorov

Se establecerá un espacio de probabilidad $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ tal que la ecuación de Smoluchowski sea la ecuación de Komogorov para un proceso markoviano $(X_t)_{t\geq 0}$. Se puede ver que si $\sum_{i=1}^{\infty} i c_t(i) < \infty$ entonces:

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\sum_{i=1}^{\infty} ic_t(i) &= \sum_{i=1}^{\infty} i\frac{d}{dt}c_t(i)\\
&= \sum_{i=1}^{\infty} i(\sum_{j\in\mathbb{N}^*} F_{i,j}c_t(i+j) - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{i-1} F_{j,i-j}c_t(i))\\
&= \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} iF_{i,j}c_t(i+j) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{i-1} iF_{j,i-j}c_t(i)\\
&= \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} iF_{i,j}c_t(i+j) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty}(i+j)F_{j,i}c_t(i+j)\\
&= \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} iF_{i,j}c_t(i+j) - \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} iF_{i,j}c_t(i+j) = 0
\end{aligned}
$$

Normalizando se puede suponer que $\sum_{i=1}^{\infty} ic_t(i) = 1$ para todo instante de tiempo t ya que la cantidad $\sum_{i=1}^{\infty} ic_t(i)$ se mantiene constante como muestra su derivada, luego se puede asociar un proceso estocástico $(X_t)_{t\geq 0}$ en $\mathbb{N}^{[0,\infty)}$ y una probabilidad $\mathbb{P}$ tal que

$$\mathbb{P}\{X_t(w) = i\} = p_t(i) = ic_t(i) \tag{4}$$

Donde $w = (w_t)_{t\geq 0}$ y $X_t(w) = w_t$ ($X_t(w)$ representa el tamaño de una partícula en el tiempo t).

Para esto se debe observar que una cadena de Markov $(X_t)_{t\geq 0}$ que toma valores en $\mathbb{N}$ cumple con la fórmula de Kolmogorov:

$$\frac{d}{dt}p_t(i) = -v_i p_t(i) + \sum_{j\neq i} p_t(j) v_j p_{ji} \tag{5}$$

Donde $p_t(i) = P\{X_t = i\}$, v_i es la tasa o parámetro del tiempo de permanencia en el estado i y p_{ji} es la probabilidad de transitar del estado j al i. Por el contrario, si se tienen las ecuaciones de Kolmogorov, es posible construir un proceso Markoviano que cumpla con dichas ecuaciones (cfr. [18]).

La ecuación de fragmentación de Smoluchowski para la concentración, se puede escribir en términos de las probabilidades que definen, basta multiplicar (2) por i y a través del cambio de variable $\tilde{F}_{i,j} = \frac{i}{i+j} F_{i,j}$ se obtiene:

$$\frac{d}{dt} i c_t(i) = \frac{d}{dt} p_t(i) = \sum_{j \in \mathbb{N}^*} F_{i,j} i c_t(i+j) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} F_{j,i-j} i c_t(i)$$
$$= \sum_{j \in \mathbb{N}^*} F_{i,j} \frac{i}{i+j} (i+j) c_t(i+j) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} F_{j,i-j} p_t(i)$$

Ahora $\tilde{F}_{i-j,j} = \frac{i-j}{i} F_{i-j,j}$ y $\tilde{F}_{j,i-j} = \frac{j}{i} F_{j,i-j} = \frac{j}{i} F_{i-j,j}$. Luego $\tilde{F}_{i-j,j} + \tilde{F}_{j,i-j} = F_{i-j,j}$, por lo tanto:

$$\frac{d}{dt} p_t(i) = \sum_{j \in \mathbb{N}^*} \tilde{F}_{i,j} p_t(i+j) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} (\tilde{F}_{i-j,j} + \tilde{F}_{j,i-j}) p_t(i)$$

Con esto se llega a la siguiente ecuación:

$$\frac{d}{dt} p_t(i) = -\sum_{j=1}^{i-1} \tilde{F}_{j,i-j} p_t(i) + \sum_{j \in \mathbb{N}^*} \tilde{F}_{i,j} p_t(i+j) \tag{6}$$

Luego se establece que $\tilde{F}_{j,i-j} = p_{ij} v_i$ con $p_{ij} > 0$, $p_{ij} = 0$ si $j \geq i$ y $\sum_{j \geq 1} p_{ij} = 1$. De esto resulta que $v_i = \sum_{j=1}^{i-1} \tilde{F}_{j,i-j}$ y $p_{ij} = \tilde{F}_{j,i-j} / \sum_{j=1}^{i-1} \tilde{F}_{j,i-j}$ con lo que se tiene el siguiente teorema:

Teorema 2.1 *Existe un espacio $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ y un proceso Markoviano $(X_t)_{t \geq 0}$ (con valores en $\mathbb{N}$) tal que la ecuación de fragmentación de Smoluchowski corresponde a la ecuación de Kolmogorov del proceso.*

Sea $\mathcal{A} := \{f : \mathbb{N} \to \mathbb{C} | f \text{ es medible y acotada}\}$ y $\mathcal{B} := \{f : \Omega \to \mathbb{C} | f \text{ es medible y acotada}\}$. Se define $j_t : \mathcal{A} \to \mathcal{B}$ como $j_t(f) = f(X_t)$. Sobre $\mathcal{A}$ se puede definir el siguiente semigrupo:

$$T_t f(k) = \mathbb{E}_k(j_t(f)) = \mathbb{E}(f(X_t) | X_0 = k)$$

Este semigrupo da cuenta de la dinámica promedio de alguna observación del proceso. Para determinar dicha dinámica, una alternativa es "agrandar" el espacio, determinar el comportamiento de un observable en un sistema abierto, es decir, con perturbaciones aleatorias provocadas por el medio en cual se encuentra (el cual provoca la respectiva disipación de energía) y luego calcular la esperanza. El proceso de "agrandar" el espacio se llama dilatación y es un concepto clave al momento de estudiar los sistemas cuánticos abiertos. Como se verá más adelante, el mecanismo de trabajar en un álgebra $\mathcal{A}$ y establecer un flujo en un álgebra más grande $\mathcal{B}$ para luego devolverse al espacio original es una técnica que se ocupará constantemente a lo largo de esta tesis, por lo que se ha querido introducir a esta altura.

Se puede calcular el respectivo generador del semigrupo Markoviano como

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\mathbb{E}(f(X_t)) &= \frac{d}{dt}\sum_{i=1}^{\infty} f(i)p_t(i) = \sum_{i=1}^{\infty} f(i)i\frac{d}{dt}c_t(i) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} f(i)i(\sum_{j\in\mathbb{N}^*} F_{i,j}c_t(i+j) - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{i-1} F_{j,i-j}c_t(i)) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} f(i)iF_{i,j}c_t(i+j) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{i-1} f(i)iF_{j,i-j}c_t(i) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} f(i)iF_{i,j}c_t(i+j) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} f(i+j)(i+j)F_{j,i}c_t(i+j) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} f(i)iF_{i,j}c_t(i+j) - \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} f(i+j)iF_{i,j}c_t(i+j) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} \frac{f(i)-f(i+j)}{i+j} iF_{i,j}p_t(i+j) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{i-1} (f(i-j)-f(i))\frac{i-j}{i}F_{i-j,j}p_t(i)
\end{aligned}$$

De esta manera:

$$\mathcal{L}f(k) := \frac{d}{dt}\mathbb{E}_k(f(X_t))\mid_{t=0} = \sum_{j=1}^{k-1}(f(k-j)-f(k))\frac{k-j}{k}F_{k-j,j} \tag{7}$$

Ya que $p_t(i) = 1$ si $i = k$ y cero si no. La información que entrega el generador es de suma importancia, entre otras cosas para la simulación computacional del proceso. Se verá que muchos sistemas cuánticos pueden reducirse a un sistema clásico, lo que permite ocupar técnicas clásicas para obtener información del sistema cuántico. Por esto se analizará un mecanismo de simulación del proceso que además entrega una interpretación al fenómeno de fractura macroscópica.

2.2. Simulación del proceso de fractura

Para la simulación del proceso, se puede escribir el generador (7) como

$$\mathcal{L}f(k) = \int_{\mathbb{N}} \int_0^{\infty} (f(k-j) - f(k)) \mathbf{1}_{\{0<j<k\}} \mathbf{1}_{\{z \leq \frac{k-j}{k} F_{k-j,j}\}} dz \mathcal{U}_{\mathbb{N}}(dj)$$

Donde dz representa la medida de Lebesgue y $\mathcal{U}_{\mathbb{N}}(dj)$ la medida uniforme en los naturales. Se sabe (cfr. [19]) que si $(X_t)_{t\geq 0}$ es un proceso markoviano y $f \in C_b^1(\mathbb{R})$, entonces:

$$f(X_t) = f(X_0) + \int_0^t \mathcal{L}f(X_{s-})ds + M_t \tag{8}$$

Donde M_t es una martingala.

Se puede dar una interpretación al fenómeno de fractura si arbitrariamente se elige una martingala. En vista que el proceso es discontinuo (cuando se fractura una partícula lo hace en una fracción de segundo) se puede suponer que la martingala se obtiene de un proceso a saltos como el de Poisson. Para esta interpretación se ocupará un proceso de Poisson marcado, que es la generalización natural del proceso de Poisson convencional. Sea $N(dz, dj, dt)$ un proceso de Poisson marcado cuyo espacio de marcas es $(0, \infty) \times \mathbb{N}$ dotado de la $\sigma-$algebra producto $\mathcal{B}(0,\infty) \otimes \mathcal{P}(\mathbb{N})$ (con $\mathcal{P}(\mathbb{N})$ las partes de $\mathbb{N}$ y $\mathcal{B}(0,\infty)$ los borelianos de $(0,\infty)$) y la medida producto $\mathcal{U}_{\mathbb{N}}(dj)dz$ con intensidad $\lambda_t(dzdj) = dzdj$, entonces es sabido que:

$$M_t =$$

$$\int_0^t \int_{\mathbb{N}} \int_0^{\infty} (f(X_{s-} - j) - f(X_{s-})) \mathbf{1}_{\{0<j<X_{s-}\}} \mathbf{1}_{\{z \leq \frac{X_{s-}-j}{X_{s-}} F_{X_{s-}-j,j}\}} (N(dz, dj, ds) - dzdjds)$$

es una martingala (cfr. [19]).

Al ocupar dicha martingala para representar el fenómeno y reemplazarla en (8), se obtiene:

$$f(X_t) - f(X_0) =$$
$$\int_0^t \int_{\mathbb{N}} \int_0^\infty (f(X_{s-} - j) - f(X_{s-}))\mathbf{1}_{\{0<j<X_{s-}\}}\mathbf{1}_{\{z\leq \frac{X_{s-}-j}{X_{s-}}F_{X_{s-}-j,j}\}}N(dz,dj,ds)$$

Al tomar $f(k) = k$ (para esto se debe pedir que $\sum_{i=1}^\infty ip_t(i) < \infty$), entonces $(X_t)_{t\geq 0}$ satisface la siguiente ecuación diferencial estocástica:

$$X_t = X_0 - \int_0^t \int_{\mathbb{N}} \int_0^\infty j\mathbf{1}_{\{0<j<X_{s-}\}}\mathbf{1}_{\{z\leq \frac{X_{s-}-j}{X_{s-}}F_{X_{s-}-j,j}\}}N(dz,dj,ds) \tag{9}$$

Luego interesa demostrar que si un proceso $(X_t)_{t\geq 0}$ satisface la ecuación (9), entonces su ley marginal satisface la ecuación (2). Para esto hay que definir de manera correcta el espacio, por lo que es necesario hacer algunas definiciones (cfr. [8]).

Definición 2.1 *Sea $T \in (0,\infty]$ y $(c_0(k))_{k\geq 1}$ una secuencia de números reales positivos. Se llama solución débil del sistema de fragmentación de Smoluchowski Discreto (SD) en $(0,T]$ a la secuencia de funciones continuas positivas tal que para todo $t \in (0,T)$ y $i \geq 1$:*

- $c_.(i) \in C([0,T])$ *y* $\sum_{j\in\mathbb{N}^*} F_{i,j}c_t(i+j) \in L^1(0,t)$ *(funciones integrables en $(0,t)$)*
- $c_t(i) = c_0(i) + \int_0^t(\sum_{j\in\mathbb{N}^*} F_{i,j}c_s(i+j) - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{i-1} F_{j,i-j}c_s(i))ds$

Se denota por $\mathbb{D}([0,T),\mathbb{N})$ el conjunto de funciones positivas y cadlai (continuas a la derecha con límite a la izquierda) de $[0,T)$ en $\mathbb{N}$. Se escribe también $\mathcal{P}_1([0,T),\mathbb{N})$ el conjunto de medidas de probabilidad Q en $\mathbb{D}([0,T),\mathbb{N})$ tal que

$$Q(\{x \in \mathbb{D}([0,T),\mathbb{N}); x(0) > 0\}) = 1$$

Definición 2.2 *Considerar el espacio de probabilidad* $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. *Sea* $T \leq \infty$ *y* p_0 *tal que* $\sum_k kp_0(k) < \infty$. *Se dice que* (X_0, X, N) *es solución de la ecuación diferencial estocástica (EDS) en* $[0, T)$ *si:*

- $X_0 : \Omega \to \mathbb{N}$ *es una variable aleatoria cuya ley es* p_0.
- $X_t(\omega) : [0, T) \times \Omega \to \mathbb{N}$ *es un proceso* $L_1^T(\mathbb{N})$. *Donde un elemento está en* $L_1^T(\mathbb{N})$ *si es cadlai y su ley está en* $\mathcal{P}_1([0, T), \mathbb{N})$.
- $N(\omega, dt, dj, dz)$ *es una medida de Poisson en* $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{N} \times \mathbb{R}_+$ *(donde* dz *denota la medida de Lebesgue) con intensidad* $dt\mathcal{U}_{\mathbb{N}}(dj)dz$.
- *Para todo* $t \in [0, T)$ $\sup_{s\in[0,t)} \mathbb{E}(F(j, X_s - j)\mathbf{1}_{\{0<j<X_{s-}\}}) < \infty$
- *La siguiente ecuación diferencial estocástica es satisfecha*

$$X_t = X_0 - \int_0^t \int_{\mathbb{N}} \int_0^\infty j\mathbf{1}_{\{0<j<X_{s-}\}}\mathbf{1}_{\{z \leq F(j, X_{s-}-j)\frac{X_{s-}-j}{X_{s-}}\}} N(ds, dj, dz)$$

Teorema 2.2 *Sea* (X_0, X, N) *solución de (EDS) en* $[0, T)$. *Luego las leyes marginales de* X $(\{Ley(X_t)\}_{t\in[0,T)})$ *solucionan (SD) con condición inicial* c_0.

Demostración

Sea $f \in C_b^1(\mathbb{R})$, luego

$$\begin{aligned} f(X_t) &= f(X_0) + \sum_{s\leq t}[f(X_s) - f(X_{s-})] \\ &= f(X_0) + \int_0^t \int_{\mathbb{N}} \int_0^\infty [f(X_{s-} - j\mathbf{1}_{\{0<j<X_{s-}\}}\mathbf{1}_{\{z\leq F(j, X_{s-}-j)\frac{X_{s-}-j}{X_{s-}}\}}) - f(X_{s-})]N(ds, dj, dz) \\ &= f(X_0) + \int_0^t \int_{\mathbb{N}} \int_0^\infty [f(X_{s-} - j) - f(X_{s-})]\mathbf{1}_{\{0<j<X_{s-}\}}\mathbf{1}_{\{z\leq F(j, X_{s-}-j)\frac{X_{s-}-j}{X_{s-}}\}}N(ds, dj, dz) \end{aligned}$$

De esta manera

$$M_t^f := f(X_t) - f(X_0) - \int_0^t \int_{\mathbb{N}} \int_0^\infty [f(X_{s-} - j) - f(X_{s-})] \mathbf{1}_{\{0<j<X_{s-}\}} \mathbf{1}_{\{z \le F(j, X_{s-} - j) \frac{X_{s-}-j}{X_{s-}}\}} dz \mathcal{U}_{\mathbb{N}}(dj) ds$$

es una martingala. Pero

$$M_t^f = f(X_t) - f(X_0) - \int_0^t \sum_{j=1}^{X_{s-}-1} (f(X_{s-} - j) - f(X_{s-})) \frac{X_{s-} - j}{X_{s-}} F_{X_{s-}-j,j} ds$$

Tomando esperanza y ocupando Fubini

$$\sum_{i=1}^{\infty} f(i) p_t(i) = \sum_{i=1}^{\infty} f(i) p_0(i) + \int_0^t \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{i-1} (f(i-j) - f(i)) \frac{i-j}{i} F_{i-j,j} p_s(i) ds$$

Al definir $c_t(i) = p_t(i)/i$, se obtiene:

$$\begin{aligned}
&\textstyle\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{i-1} (f(i-j) - f(i)) \frac{i-j}{i} F_{i-j,j} p_t(i) \\
&\quad = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{f(i) - f(i+j)}{i+j} i F_{i,j} p_t(i+j) \\
&\quad = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} f(i) i F_{i,j} c_t(i+j) - \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} f(i+j) i F_{i,j} c_t(i+j) \\
&\quad = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} f(i) i F_{i,j} c_t(i+j) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} f(i+j)(i+j) F_{j,i} c_t(i+j) \\
&\quad = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} f(i) i F_{i,j} c_t(i+j) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{i-1} f(i) i F_{j,i-j} c_t(i)
\end{aligned}$$

Si se toma $f \in C_b^1(\mathbb{R})$ de tal manera que sea 1 en un determinado i, pero cero en el resto, se tiene:

$$i c_t(i) = i c_0(i) + \int_0^t i \Big(\sum_{j \in \mathbb{N}^*} F_{i,j} c_s(i+j) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} F_{j,i-j} c_s(i) \Big) ds$$

Finalmente

$$c_t(i) = c_0(i) + \int_0^t (\sum_{j\in\mathbb{N}^*} F_{i,j}c_s(i+j) - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{i-1} F_{j,i-j}c_s(i))ds$$

□

Una forma de demostrar la existencia de (EDS) es construir el proceso salto a salto (con lo que se tiene un método de simulación). Para esto hay que tomar un espacio de probabilidad $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ tal que exista un proceso de Poisson marcado $N(dz, dj, dt)$ con marcas en $((0,\infty)\times\mathbb{N}, \mathcal{B}(0,\infty)\otimes\mathcal{P}(\mathbb{N}), \mathcal{U}_{\mathbb{N}}(dj)dz)$ e intensidad $\lambda_t(dzdj) = dzdj$. Se construye el siguiente proceso:

$$X_t = X_0 - \sum_{n\geq 1} j_n \mathbf{1}_{\{0<j_n<X_{T_n-}\}} \mathbf{1}_{\{z_n \leq \frac{X_{T_n-}-j_n}{X_{T_n-}} F_{X_{T_n-}-j_n, j_n}\}} \mathbf{1}_{\{T_n\leq t\}} \tag{10}$$

Donde $(T_n)_{n\in\mathbb{N}}$ son los tiempos de salto del Poisson y $T_n - T_{n-1}$ dado X_{T_n-} sigue una ley exponencial de parámetro:

$$A = (X_{T_n-} - 1)\sup\{\tfrac{X_{T_n-}-j}{X_{T_n-}} F_{X_{T_n-}-j,j} : j \in [1, X_{T_n-}-1]\}$$

j_n y z_n dado X_{T_n-} siguen una ley $\mathcal{U}_{\mathbb{N}}(1, Z_{T_n-} - 1)$ y $\mathcal{U}_{\mathbb{R}}(0, \sup\{\frac{X_{T_n-}-j}{X_{T_n-}} F_{X_{T_n-}-j,j} : j \in [1, X_{T_n-}-1]\}$ respectivamente.

Es fácil ver que este proceso soluciona (EDS) donde una trayectoria típica se muestra en la Figura 1.

Para obtener una estimación de la distribución del proceso al tiempo t se puede hacer una simulación de montecarlo, es decir, simular muchas trayectorias y hacer un histograma respecto del tamaño de la partícula en el tiempo t.

Es oportuno redondear la idea de lo que se lleva hasta el momento con el fin de recuperar conceptos cruciales en los sistemas cuánticos abiertos. Se partió estudiando la ecuación de fragmentación de Smoluchowski que es la ecuación de Kolmogorov para un proceso markoviano $(X_t)_{t\geq 0}$. Estas ecuaciones determinan el comportamiento respecto del tiempo

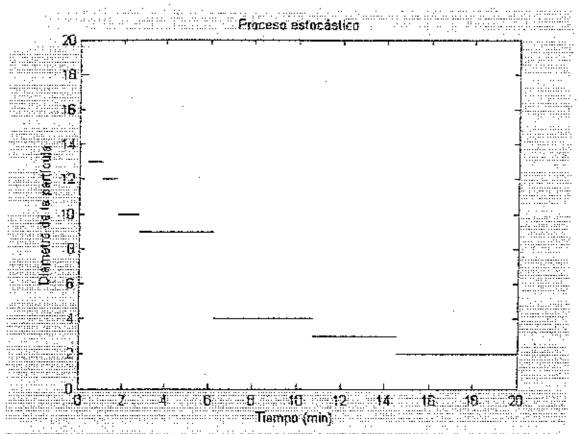

Figura 1: Fragmentación de una partícula de mineral de cobre (cfr. [1])

de las leyes marginales del proceso, es decir, proporcionan información acerca de la dinámica de los estados. En muchas aplicaciones físicas la dinámica se entrega de esa manera, pero más interesante aún es determinar la dinámica de un observable del proceso, ya que esos son los elementos con los que se trabaja en el laboratorio. Dada la evolución para los estados (o probabilidades), es posible determinar la dinámica de los observables. Un método para hacerlo es "agrandar" o dilatar el espacio para obtener una ecuación diferencial estocástica acorde con dicha dinámica. Esta ecuación diferencial estocástica da cuenta de la evolución del proceso en un sistema abierto, donde las perturbaciones del sistema disipan energía. Dado esto, se puede obtener el comportamiento de un observable del proceso a través del tiempo, es decir, se puede obtener una ecuación diferencial estocástica para $(f(X_t))_{t\geq 0}$ que se puede proyectar al tomar esperanza y así obtener la dinámica sobre el álgebra de los observables (una dinámica sobre f). Esta es la idea central al momento de estudiar sistemas cuánticos abiertos, por lo que la estrategia de análisis será exactamente la misma.

3. Cuantización de la ecuación de Smoluchowski: caso finito dimensional

Para los sistemas cuánticos (fenómenos microscópicos) la observación requiere de especial cuidado, ya que se ha demostrado experimentalmente que el hecho de observar altera el estado del sistema. De esta manera, presenciar un fenómeno a través de un observable y luego de otro distinto, no es lo mismo que hacerlo al revés. Esto requiere un formalismo probabilístico distinto al formulado por Kolmogorov, en donde de alguna manera $\mathbb{E}(XY) \neq \mathbb{E}(YX)$. Von Neumann desarrolló dicho marco teórico, uno no conmutativo donde la probabilidad conmutativa de Kolmogorov es sólo un caso particular. Para esto, a cada sistema cuántico debe asociarse un espacio de Hilbert $\mathfrak{h}$ y el espacio de Banach $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$ de los operadores acotados de $\mathfrak{h}$, donde el estado del sistema es un operador positivo de traza 1. Las variables aleatorias serán operadores autoadjuntos y la esperanza de dicha variable bajo un estado ρ se calculará como $\mathbb{E}_\rho(X) = traza(\rho X)$. De esta manera se tendrá generalmente que $\mathbb{E}_\rho(XY) \neq \mathbb{E}_\rho(YX)$. Pero esto no se detiene aquí, estos conceptos pueden seguir generalizándose en una teoría de probabilidades no conmutativas en $*-$álgebras con unidad, donde $\mathbb{E}$, o estado del sistema, es una transformación lineal que llega al campo tal que $\mathbb{E}(\mathbb{1}) = 1$ y $\mathbb{E}(a^*a) \geq 0$ para todo a en la $*-$álgebra $\mathcal{A}$. En este contexto las variables aleatorias serán $*-$homomorfismos que van de otra $*-$álgebra $\mathcal{B}$ en $\mathcal{A}$. Dos tipos de $*-$álgebras son importantes: las C^*-álgebras y las álgebras de von Neumann. Estas últimas son muy útiles cuando se quiere estudiar la dinámica de un sistema cuántico abierto donde la noción de semigrupo dinámico cuántico es fundamental.

Definición 3.1 *Un semigrupo dinámico cuántico en un álgebra de von Neumann $\mathfrak{M}$ es un semigrupo w^*-continuo $(\mathcal{T}_t)_{t\geq 0}$ de mapeos normales y completamente positivos de $\mathfrak{M}$ en si mismo tal que $\mathcal{T}_t(\mathbb{1}) \leq \mathbb{1}$ y $\mathcal{T}_0$ es la identidad. Se dice Markoviano si $\mathcal{T}_t(\mathbb{1}) = \mathbb{1}$*

Toda álgebra de von Neumann se puede ver como el dual de otro espacio llamado predual (cfr. [17]). Cuando se toma $\mathfrak{M} = \mathfrak{B}(\mathfrak{h})$ es sabido que su predual es $\mathcal{I}_1(\mathfrak{h})$ (operadores con traza), por lo que $(\mathcal{T}_t)_{t\geq 0}$ es w^*-continuo si $t \mapsto traza(\rho \mathcal{T}_t(X))$ es continuo para todo $\rho \in \mathcal{I}_1(\mathfrak{h})$ y $X \in \mathfrak{B}(\mathfrak{h})$. Normalidad significa que cada vez que se tenga una red creciente

(X_α) en $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})^+$ (operadores acotados positivos) con envolvente superior X, se tenga que la envolvente superior de $(\mathcal{T}_t(X_\alpha))$ es $\mathcal{T}_t(X)$. Completa positividad quiere decir que cada vez que un operador $\mathbb{X} = [X_{l,m}]$ en $\oplus^n \mathfrak{h}$ es positivo ($X_{l,m} \in \mathfrak{B}(\mathfrak{h})$), entonces $[\mathcal{T}_t(X_{l,m})]$ también lo es para todo $n \geq 1$.

El generador del semigrupo $\mathcal{L}$ se define sobre el dominio

$$Dom(\mathcal{L}) = \{X \in \mathfrak{M} : \exists\ w^* - lim_{t\to 0}\tfrac{\mathcal{T}_t(X)-X}{t}\}$$

Como $\mathcal{L}(X) = w^* - lim_{t\to 0}\frac{\mathcal{T}_t(X)-X}{t}$.

No se sabe en general la forma de $\mathcal{L}$, pero se cuenta con algunos resultados en casos particulares, por ejemplo si $\mathfrak{M} = \mathfrak{B}(\mathfrak{h})$ y el semigrupo es continuo en norma, entonces el generador tiene la forma de Lindblad (cfr. [16])

$$\mathcal{L}(X) = i[H, X] - \frac{1}{2}\sum_j (L_j^* L_j X - 2L_j^* X L_j + X L_j^* L_j) \tag{11}$$

Donde H y los L_j son operadores acotados en $\mathfrak{h}$.

Otra posibilidad es cuando se conoce el generador en la forma de Linblad y a partir de él construir un semigrupo. Esta será la estrategia ocupada en lo que sigue.

El objetivo de esta sección es cuantizar la ecuación de fragmentación de Smoluchowski a partir de su generador dado en (7), esto es, pasar del formalismo probabilista de Kolmogorov al de von Neumann. Para esto se estudiará la dinámica en un álgebra de von Neumann, tal que, al restringirse sobre una subálgebra abeliana, se recupere el caso clásico. Por simplicidad, se considerará que la partícula puede tomar sólo un número finito d de clases de tamaño.

Sea $\mathfrak{h} = \mathbb{C}^d$ con $\{e_k\}_{k=1}^d$ su base canónica. En este espacio se definen los siguientes operadores:

- $Ne_k = ke_k$

- $Se_k = e_{k+1}$ si $k+1 \leq d$ y cero si $k = d$

Observar que N es autoadjunto y que $S^*e_k = e_{k-1}$ si $k > 1$ y cero si no.

Para $\varphi : \mathbb{N} \to \mathbb{C}$ se tiene $\varphi(N)e_k = \varphi(k)e_k$.

A partir de lo anterior se definen los siguientes operadores acotados:

$$L_j = N^{1/2}(S^*)^j N^{-1/2}\sqrt{F_{N-j,j}}\mathbf{1}_{(j,d]}(N) \tag{12}$$

Notar que $L_je_k = \sqrt{F_{k-j,j}}\sqrt{\frac{k-j}{k}}\mathbf{1}_{(j,d]}(k)e_{k-j}$ y su adjunto es $L_j^*e_k = \sqrt{F_{k,j}}\sqrt{\frac{k}{k+j}}\mathbf{1}_{[1,d-j]}(k)e_{k+j}$. Se define el operador autoadjunto $G = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d-1} L_j^*L_j$ luego $Ge_k = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{k-1} F_{k-j,j}\frac{k-j}{k}e_k$. De esta manera se tiene un generador al estilo Lindblad de la forma:

$$\mathcal{L}(X) := -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d-1}(L_j^*L_jX - 2L_j^*XL_j + XL_j^*L_j)$$

Donde $X \in \mathfrak{B}(\mathfrak{h})$.

La interpretación física es la siguiente: el operador L_j hace que una partícula de nivel energético o tamaño k (representado por e_k) reduzca su nivel a $k-j$ ponderado por un factor de equilibrio de masa. Se puede recuperar la interpretación clásica del fenómeno al restringirse a la subálgebra abeliana de $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$ generada por N, $\mathcal{A}_N = \{f(N) : f \in \mathbb{C}^d\}$, se puede ver fácilmente que

$$\mathcal{L}(f(N))e_k = (\sum_{j=1}^{k-1}(f(k-j) - f(k))\frac{k-j}{k}F_{k-j,j})e_k$$

Las preguntas a responder son las siguientes: ¿Existirá un semigrupo sobre $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$ que tenga como generador a $\mathcal{L}$? ¿Qué pasa si se considera a la partícula inmersa en un baño con el que interactúa? Afortunadamente estas dos preguntas se pueden responder simultáneamente en el caso finito dimensional, que es el tema de la siguiente sección.

3.1. Dilatación y semigrupo

En esta sección se considerará a la partícula inmersa en un baño con el que interactúa. Para esto, hay que abrir el sistema ampliando el espacio. Sobre los operadores de dicho espacio se construirá una familia de automorfismos que se proyectarán a los operadores del espacio original obteniendo un semigrupo. Este semigrupo tendrá como generador a $\mathcal{L}$.

3.1.1. Dilatación clásica

Las dilataciones pueden hacerse de manera clásica o cuántica. Para la dilatación clásica se puede tomar un espacio de probabilidad $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ tal que existan $d-1$ procesos de Wienner independientes, luego en la dilatación $\mathfrak{h} \otimes L^2_{\mathbb{C}}(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}) \cong L^2_{\mathfrak{h}}(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ se puede plantear la siguiente ecuación diferencial estocástica (con ruidos clásicos):

$$\psi_t = \psi - \frac{1}{2}\int_0^t \sum_{j=1}^{d-1} L_j^* L_j \psi_s ds + \sum_{j=1}^{d-1} \int_0^t L_j \psi_s dW_s^j \tag{13}$$

O de manera equivalente

$$d\psi_t = dZ_t \psi_t,\ \psi_0 = \psi$$

Donde $Z_t = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d-1} L_j^* L_j t + \sum_{j=1}^{d-1} L_j W_t^j$.

Se puede demostrar que la ecuación (13) admite una única solución, ya que los operadores son acotados y se cumplen las condiciones de Lipschitz (cfr. [20]), que tiene la siguiente propiedad:

$$
\begin{aligned}
d\langle\psi_t,\psi_t\rangle &= \langle d\psi_t,\psi_t\rangle + \langle\psi_t, d\psi_t\rangle + \langle d\psi_t, d\psi_t\rangle \\
&= \langle dZ_t\psi_t,\psi_t\rangle + \langle\psi_t, dZ_t\psi_t\rangle + \langle dZ_t\psi_t, dZ_t\psi_t\rangle \\
&= \langle -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d-1} L_j^*L_j\psi_t dt + \sum_{j=1}^{d-1} L_j\psi_t dW_t^j, \psi_t\rangle + \langle\psi_t, -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d-1} L_j^*L_j\psi_t dt + \sum_{j=1}^{d-1} L_j\psi_t dW_t^j\rangle + \\
&\langle -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d-1} L_j^*L_j\psi_t dt + \sum_{j=1}^{d-1} L_j\psi_t dW_t^j, -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d-1} L_j^*L_j\psi_t dt + \sum_{j=1}^{d-1} L_j\psi_t dW_t^j\rangle \\
&= \langle\psi_t, (\sum_{j=1}^{d-1} L_j^*L_j - \sum_{j=1}^{d-1} L_j^*L_j)\psi_t\rangle dt + \sum_{j=1}^{d-1}\langle\psi_t, (L_j^* + L_j)\psi_t\rangle dW_t^j
\end{aligned}
$$

Luego $\frac{d}{dt}\mathbb{E}(||\psi_t||^2) = 0$. Por lo tanto, al tomar un vector ψ de norma 1 se tiene $\mathbb{E}(||\psi_t||^2) = 1$. Con esto se define un proceso de operadores $(V_t)_{t\geq 0}$ con $V_t : \mathfrak{h} \to L^2_{\mathfrak{h}}(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ tal que $V_t\psi = \psi_t$ la única solución de (13) partiendo de ψ. Observar que $||V_t\psi||^2 = \mathbb{E}(||\psi_t||^2) = 1$ si $||\psi|| = 1$.

Se define el semigrupo $(\mathcal{T}_t)_{t\geq 0}$ sobre $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$ como

$$\langle\varphi, \mathcal{T}_t(X)\psi\rangle = \mathbb{E}(\langle V_t\varphi, XV_t\psi\rangle) = \langle\varphi_t, X\psi_t\rangle_{L^2_{\mathfrak{h}}(\Omega,\mathcal{F},\mathbb{P})} \tag{14}$$

Para este semigrupo se tiene lo siguiente:

Teorema 3.1 *La colección de mapeos $(\mathcal{T}_t)_{t\geq 0}$ es un semigrupo dinámico cuántico Markoviano sobre $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$. Este semigrupo tiene como generador a $\mathcal{L}$.*

Demostración:

Por el lema de Riesz el operador queda bien definido. Observar que si $||\varphi|| = ||\psi|| = 1$, entonces

$$\begin{aligned}
|\langle\varphi, \mathcal{T}_t(X)\psi\rangle| &\leq \mathbb{E}(|\langle\varphi_t, X\psi_t\rangle|) \\
&\leq ||X||\mathbb{E}(||\varphi_t||||\psi_t||) \\
&\leq \frac{||X||}{2}\mathbb{E}(||\varphi_t||^2 + ||\psi_t||^2) \\
&= ||X||
\end{aligned}$$

Al tomar $\varphi = \mathcal{T}_t(X)\psi$ se tiene que $||\mathcal{T}_t(X)\psi||^2 \leq ||X||$ si $||\psi|| = 1$, luego $\mathcal{T}_t : \mathfrak{B}(\mathfrak{h}) \to \mathfrak{B}(\mathfrak{h})$. Por otro lado $\langle\varphi, \mathcal{T}_s\mathcal{T}_t(X)\psi\rangle = \mathbb{E}(\langle\varphi_s, \mathcal{T}_t(X)\psi_s\rangle) = \mathbb{E}(\langle\varphi_{t+s}, X\psi_{t+s}\rangle) = \langle\varphi, \mathcal{T}_{t+s}(X)\psi\rangle$ (propiedad de semigrupo). Observar que $|\langle\varphi, \mathcal{T}_t(X)\psi\rangle - \langle\varphi, X\psi\rangle| \leq \frac{||X||}{2}\mathbb{E}(||\varphi_t - \varphi||^2 + ||\psi_t - \psi||^2)$ lo que demuestra la w^*−continuidad (la topología débil coincida con la w^* en $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$). Al tomar $X_1, ..., X_n$ elementos de $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$ y $\varphi_1, ..., \varphi_n$ elementos de $\mathfrak{h}$ se tiene que

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j=1}^{n}\langle\varphi_j, \mathcal{T}_t(X_j^*X_i)\varphi_i\rangle &= \sum_{i,j=1}^{n}\mathbb{E}(\langle\varphi_j(t), X_j^*X_i\varphi_i(t)\rangle) \\
&= \mathbb{E}(\sum_{i,j=1}^{n}\langle\varphi_j(t), X_j^*X_i\varphi_i(t)\rangle) \\
&= \mathbb{E}(||\sum_{i=1}^{n}X_i\varphi_i(t)||^2) \geq 0
\end{aligned}$$

Por lo que se tiene la completa positividad. Sea $(X_\alpha)_\alpha$ una red creciente en $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})^+$ con envolvente superior X, luego

$$\begin{aligned}
\langle\varphi, \mathcal{T}_t(X_\alpha)\varphi\rangle &= \mathbb{E}(\langle\varphi_t, X_\alpha\varphi_t\rangle) \\
&\leq \mathbb{E}(\langle\varphi_t, X\varphi_t\rangle) \\
&= \langle\varphi, \mathcal{T}_t(X)\varphi\rangle
\end{aligned}$$

Si existiese otra mínima cota superior A para $(\mathcal{T}_t(X_\alpha))_\alpha$, entonces existiría un $\varphi \in \mathfrak{h}$ tal que $\langle\varphi, \mathcal{T}_t(X_\alpha)\varphi\rangle \leq \langle\varphi, AX\varphi\rangle = \langle\varphi, \mathcal{T}_t(X)\varphi\rangle - \epsilon$ lo que implicaria que $\mathbb{E}(\langle\varphi_t, (X -$

$X_\alpha)\varphi_t\rangle) \geq \epsilon$ para todo α. Esto es una contradicción, ya que X es la mínima cota superior de $(X_\alpha)_\alpha$ por lo que la integral debería converger a cero (teorema de la convergencia monótona). Luego el semigrupo es de transformaciones normales.

Mediante la fórmula de Ito se puede calcular

$$\begin{aligned}
d\langle\varphi_t, X\psi_t\rangle &= \langle d\varphi_t, X\psi_t\rangle + \langle\varphi_t, Xd\psi_t\rangle + \langle d\varphi_t, Xd\psi_t\rangle \\
&= \langle dZ_t\varphi_t, X\psi_t\rangle + \langle\varphi_t, XdZ_t\psi_t\rangle + \langle dZ_t\varphi_t, XdZ_t\psi_t\rangle \\
&= \langle -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d-1} L_j^*L_j\psi_t dt + \sum_{j=1}^{d-1} L_j\psi_t dW_t^j, X\psi_t\rangle + \langle\varphi_t, -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d-1} XL_j^*L_j\psi_t dt + \sum_{j=1}^{d-1} XL_j\psi_t dW_t^j\rangle + \\
&\quad \langle -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d-1} L_j^*L_j\psi_t dt + \sum_{j=1}^{d-1} L_j\psi_t dW_t^j, -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d-1} XL_j^*L_j\psi_t dt + \sum_{j=1}^{d-1} XL_j\psi_t dW_t^j\rangle \\
&= \langle\varphi_t, \mathcal{L}(X)\psi_t\rangle dt + \sum_{j=1}^{d-1}\langle\varphi_t, (XL_j + L_jX)\psi_t\rangle dW_t^j
\end{aligned}$$

De esta manera

$$\frac{d}{dt}\mathbb{E}(\langle V_t\varphi, XV_t\psi\rangle)\mid_{t=0} = \langle\varphi, \mathcal{L}(X)\psi\rangle$$

Por lo que

$$\frac{d}{dt}\mathcal{T}_t(X)\mid_{t=0} = \mathcal{L}(X)$$

Donde la derivada es en el sentido débil. Con esto se puede ver que $\mathcal{L}(\mathbb{1}) = 0$ por lo que el semigrupo es Markoviano.

$\square$

3.1.2. Dilatación cuántica

Esta sección es un poco técnica, por lo que se verá sólo un esquema de las demostraciones. El lector interesado puede profundizar los conceptos en [16].

Para la dilatación con ruidos cuánticos, se puede tomar un espacio de Hilbert separable $\mathfrak{k}$ y tomar $\mathcal{F} = \Gamma(L^2(\mathbb{R}_+; \mathfrak{k}))$ el Fock simétrico sobre $L^2(\mathbb{R}_+; \mathfrak{k})$. Sobre este espacio se define el vector coherente $e(f) = ((n!)^{-1/2} f^{\otimes n})_{n\geq 0}$.

Sea $\{e_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ una base ortonormal de $\mathfrak{k}$. Se definen

$$\mathcal{M} = \{f \in L^2(\mathbb{R}_+; \mathfrak{k}) \cap L^\infty_{loc}(\mathbb{R}_+; \mathfrak{k}) : \langle e_k, f(t)\rangle = 0\ \forall t \geq 0 \text{ salvo para una cantidad finita de k's}\}$$

$\mathcal{E} = \langle\{e(f) : f \in \mathcal{M}\}\rangle$ la variedad lineal generada.

Luego si D es un subespacio denso en $\mathfrak{h}$, entonces el producto tensorial algebraico $D \odot \mathcal{E}$ es denso en la dilatación $\mathcal{H} = \mathfrak{h} \otimes \mathcal{F}$, por lo que se pueden definir operadores espeficicando sólo su operar ahí.

En $\mathcal{H}$, donde escribiremos $ue(f)$ en vez de $u \otimes e(f)$, se tienen los siguientes operadores:

- $A(\mathbf{1}_{[0,t)} \otimes \langle e_l|)ue(f) = \langle e_l \mathbf{1}_{[0,t)}, f\rangle ue(f)$
- $A^+(\mathbf{1}_{[0,t)} \otimes |e_m\rangle)ue(f) = \frac{d}{d\epsilon} ue(f + \epsilon \mathbf{1}_{[0,t)} e_m) |_{\epsilon=0}$
- $\Lambda(\mathbf{1}_{[0,t)} \otimes |e_m\rangle\langle e_l|)ue(f) = A^+(\mathbf{1}_{[0,t)} \otimes |e_m\rangle\langle e_l|f)ue(f)$

A partir de esto se definen los siguientes ruidos cuánticos:

- $\Lambda^0_\beta(t) = A^+(\mathbf{1}_{[0,t)} \otimes |e_\beta\rangle)$ si $\beta > 0$
- $\Lambda^\alpha_\beta(t) = \Lambda(\mathbf{1}_{[0,t)} \otimes |e_\beta\rangle\langle e_\alpha|)$ si $\alpha, \beta > 0$
- $\Lambda^\alpha_0(t) = A(\mathbf{1}_{[0,t)} \otimes \langle e_\alpha|)$ si $\alpha > 0$
- $\Lambda^0_0(t) = t\mathbb{1}$

Para estos operadores se puede definir la integral $\int_0^t X_s d\Lambda^\alpha_\beta(s)$, donde $(X_t)_{t\geq 0}$ es un proceso estocásticamente integrable.

Definición 3.2 *Sea D subespacio denso de $\mathfrak{h}$ y $\mathcal{F}_t = \Gamma(L^2([0,t);\mathfrak{k}))$. Un proceso $(X_t)_{t\geq 0}$ de operadores en $\mathcal{H}$ se dice estocásticamente integrable si:*

- $\bigcap_{t\geq 0} Dom(X_t) \supseteq D \odot \mathcal{E}$
- *$t \mapsto X_t ue(f)$ es fuertemente medible*
- *$X_t ue(f\ |_{[0,t)}) \in \mathfrak{h} \otimes \mathcal{F}_t$ y $X_t ue(f) = [X_t ue(f\ |_{[0,t)})] \otimes e(f\ |_{[t,\infty)})$ para todo $u \in D$, $f \in \mathcal{M}$ y $t > 0$.*
- *$\int_0^t ||X_s ue(f)||^2 ds < \infty$ para todo $t > 0$*

Para las integrales estocásticas cuánticas se cumple la siguiente fórmula de Ito escrita en forma diferencial:

$$d\Lambda_\mu^\nu d\Lambda_\beta^\alpha = \widehat{\delta}_\beta^\nu d\Lambda_\mu^\alpha$$

Donde $\widehat{\delta}_\beta^\nu = 1$ si $\nu = \beta > 0$ y cero en otro caso.

En $\mathfrak{B}(\mathfrak{h} \otimes \mathcal{F})$ se puede definir la siguiente ecuación diferencial estocástica:

$$V_t = \mathbb{1} + \sum_{\alpha,\beta\geq 0} \int_0^t V_s G_\beta^\alpha d\Lambda_\alpha^\beta(s) \tag{15}$$

Donde $\mathbb{G} = [G_\beta^\alpha]_{\alpha,\beta\geq 0}$ es una matriz de operadores en $\mathfrak{h}$ (tomando en cuenta la extensión $G_\beta^\alpha \otimes \mathbb{1}_\mathcal{F}$).

Definición 3.3 *Un proceso de operadores $(V_t)_{t\geq 0}$ es solucion de (15) en $D \odot \mathcal{E}$ para la matriz de operadores $\mathbb{G}$ si:*

- $D \subset \bigcap_{\alpha,\beta} Dom(G_\beta^\alpha)$
- *$\bigcup_{\alpha,\beta} G_\beta^\alpha(D) \odot \mathcal{E} \subseteq \bigcap_{t\geq 0} Dom(V_t)$, el proceso $(V_t G_\beta^\alpha)_{t\geq 0}$ es estocásticamente integrable y*

$$\sum_{\beta\geq 0} \int_0^t ||V_s G_\beta^\alpha ue(f)||^2 ds < \infty$$

Para todo $\alpha \geq 0$, $u \in D$ y $f \in \mathcal{M}$.

$$V_t = \mathbb{1} + \sum_{\alpha,\beta\geq 0} \int_0^t V_s G^\alpha_\beta d\Lambda^\beta_\alpha(s)$$

Para todo $t \geq 0$

Dos resultados son importantes en este nivel:

Teorema 3.2 *Si $\sum_{\beta\geq 0} ||G^\alpha_\beta u||^2 \leq c(\alpha)^2||u||^2$, entonces existe una única solución de (15) tal que* $\sup\{||V_s ue(f)||^2 : 0 \leq s \leq t, ||u|| \leq 1\} < \infty$ *para todo $f \in \mathcal{M}$ y $t \geq 0$.*

Se define

$$\theta_{\mathbb{G}}(X)((u^i),(v^j)) = \sum_{\alpha,\beta\geq 0} (\langle Xu^\alpha, G^\alpha_\beta v^\beta\rangle + \langle G^\beta_\alpha u^\alpha, Xv^\beta\rangle + \sum_{l\geq 0}\langle G^l_\alpha u^\alpha, XG^l_\beta v^\beta\rangle)$$

Donde $X \in \mathfrak{B}(\mathfrak{h})$, u^i y v^j son vectores en $\mathfrak{h}$.

Suponga las condiciones del teorema anterior

Teorema 3.3 *La única solución de (15) es unitaria (V_t es unitario para todo $t \geq 0$) sí y solo si $\theta_{\mathbb{G}}(\mathbb{1}) = 0$ y $\theta_{\mathbb{G}^\dagger}(\mathbb{1}) = 0$, donde $\mathbb{G}^\dagger$ es la matriz transpuesta de $\mathbb{G}$.*

Al tomar la notación diferencial, se puede escribir la ecuación como:

$$dV_t = V_t dZ_t, V_0 = \mathbb{1}$$

Donde $Z_t = \sum_{\alpha,\beta\geq 0} G^\alpha_\beta \Lambda^\beta_\alpha(t)$

Definiendo $G^0_0 = G$, $G^0_\beta = L^*_\beta$ si $\beta \in \{1, ..., d-1\}$, $G^\alpha_0 = L_\alpha$ si $\alpha \in \{1, ..., d-1\}$ y $G^\alpha_\beta = 0$ en otro caso, es posible demostrar que la ecuación (15) tiene una única solución unitaria, ya que al tener una cantidad finita de operadores acotados la hipótesis del teorema 3.2 es trivial. Además un fácil cálculo demuestra que $\theta_{\mathbb{G}}(\mathbb{1}) = \theta_{\mathbb{G}^\dagger}(\mathbb{1}) = 0$.

Esta solución es un cociclo izquierdo con la cual se puede construir la siguiente familia de automorfismos sobre $\mathfrak{B}(\mathfrak{h} \otimes \mathcal{F})$:

$$k_t(X) = V_t X V_t^* \tag{16}$$

Para esta familia de automorfismos y ocupando la fórmula de Ito, se cumple lo siguiente

$$\begin{aligned}
dk_t(X) &= dV_t X V_t^* + V_t X dV_t^* + dV_t X dV_t^* \\
&= V_t dZ_t X V_t^* + V_t X dZ_t^* V_t^* + V_t dZ_t X dZ_t^* V_t^* \\
&= \sum_{\alpha,\beta \geq 0} k_t(G_\beta^\alpha X + X(G_\beta^\alpha)^* + \sum_j G_j^\alpha X (G_j^\beta)^*) d\Lambda_\alpha^\beta(t)
\end{aligned}$$

Donde la última igualdad se tiene si $X \in \mathfrak{B}(\mathfrak{h})$.

Al definir la proyección $E : \mathfrak{h} \otimes \mathcal{F} \to \mathfrak{h}$ como $E(ue(f)) = ue(0)$, se puede obtener el siguiente semigrupo sobre $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$:

$$\mathcal{T}_t(X) = E k_t(X) E^* \tag{17}$$

Este semigrupo tendrá como generador a $\mathcal{L}$, para esto basta tomar $\alpha = \beta = 0$ donde el respectivo ruido cuántico es $d\Lambda_0^0(t) = dt$.

4. Cuantización de la ecuación de Smoluchowski: caso infinito dimensional

En esta sección se considerará que la partícula puede tomar una cantidad infinita de clases de tamaño. Para esto debe tomarse el espacio de Hilbert $\mathfrak{h} = l^2(\mathbb{N})$ con su base canónica $(e_k)_{k\in\mathbb{N}}$. Este caso es más complejo ya que se trabajará con operadores no acotados, esto requiere una nueva interpretación para el generador de Lindblad $\mathcal{L}$ a través de formas. Pero ¿existirá un semigrupo en $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$ que tenga como generador en algún sentido a $\mathcal{L}$? ¿qué pasa con la dilatación?

4.1. Semigrupo minimal

Dado una forma para un generador, es posible encontrar un semigrupo llamado minimal que tenga dicho generador. Esto se especifica en el siguiente teorema (cfr. [16]).

Teorema 4.1 *Sean G y $\{L_j\}_{j\in\mathbb{N}}$ operadores en $\mathfrak{h}$ tal que G sea el generador infinitesimal de un semigrupo de contracciones fuertemente continuo, $Dom(G) \subseteq \bigcap_{j\in\mathbb{N}} Dom(L_j)$ y que para todo $u, v \in Dom(G)$ se tenga:*

$$\langle Gv, u\rangle + \sum_{j=1}^{\infty}\langle L_j v, L_j u\rangle + \langle v, Gu\rangle = 0 \tag{18}$$

Dado $X \in \mathfrak{B}(\mathfrak{h})$, sea la forma sesquilienal definida en $Dom(G) \times Dom(G)$

$$\pounds(X)(v,u) = \langle Gv, Xu\rangle + \sum_{j=1}^{\infty}\langle L_j v, X L_j u\rangle + \langle v, XGu\rangle \tag{19}$$

Dado $D \subseteq Dom(G)$ un dominio esencial para G, existe un semigrupo minimal cuántico tal que:

$$\langle v, \mathcal{T}_t(X)u\rangle = \langle v, Xu\rangle + \int_0^t \pounds(\mathcal{T}_s(X))(v,u)ds \tag{20}$$

Para $u, v \in D$

En virtud de este teorema se definen los siguientes operadores no acotados:

- $L_je_k = (N^{1/2}(S^*)^jN^{-1/2}\sqrt{F_{N-j,j}}1_{(j,\infty)}(N))e_k = \sqrt{F_{k-j,j}}\sqrt{\frac{k-j}{k}}1_{(j,\infty)}(k)e_{k-j}$ con dominio $Dom(L_j) = \{v \in \mathfrak{h} : \sum_{k=j+1}^{\infty} |v_k|^2 F_{k-j,j}\frac{k-j}{k} < \infty\}$

- $Ge_k = (-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{\infty} L_j^* L_j)e_k = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{k-1} F_{k-j,j}\frac{k-j}{k}e_k$ con dominio $Dom(G) = \langle\{e_k\}_{k\in\mathbb{N}}\rangle$ (la variedad lineal generada por la base)

Teorema 4.2 *Existe un semigrupo minimal Markoviano $(\mathcal{T}_t)_{t\geq 0}$ sobre $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$ para el generador asociado a los operadores G y $\{L_j\}_{j\in\mathbb{N}}$ definidos anteriormente.*

Demostración:

Notar que $Ge_k = -\frac{1}{2}c_ke_k$ con $c_k = \sum_{j=1}^{k-1} F_{k-j,j}\frac{k-j}{k} \geq 0$ para todo k. Luego $\langle Ge_k, e_k\rangle = \langle -\frac{1}{2}c_ke_k, e_k\rangle = \langle e_k, -\frac{1}{2}c_ke_k\rangle$, esto demuestra que $Dom(G) \subseteq Dom(G^*)$ y que $Gv = G^*v$ para todo $v \in Dom(G)$ (G es simétrico). Además G es escencialmente autoadjunto ya que $Ker(G^* \pm i) = \{0\}$, si no se tendría la existencia de un $0 \neq v = \sum_{j=1}^{\infty} v_je_j \in \mathfrak{h}$ tal que $(G^* - i)v = 0$, esto implica que $\langle (G^* - i)v, e_k\rangle = \langle G^*v, e_k\rangle + i\langle v, e_k\rangle = 0$, pero entonces se tendría $\langle -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{\infty} v_jc_je_j, e_k\rangle = -\frac{1}{2}v_kc_k = -iv_k = -i\langle \sum_{j=1}^{\infty} v_je_j, e_k\rangle$ para todo $k \in \mathbb{N}$, lo que es una contradicción ya que $c_k \in \mathbb{R}$. Luego el operador $\overline{G}$ es autoadjunto y lo denotaremos por $G = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{\infty} L_j^*L_j$. Observar que $D = \langle\{e_k\}_{k\in\mathbb{N}}\rangle$ es dominio esencial para G y que este operador engendra un semigrupo de contracciones fuertemente continuo definido como $T_t := e^{tG}$.

Observar que si $v \in Dom(G)$, entonces

$$
\begin{aligned}
\infty > ||Gv||^2 &= \sum_{k=1}^{\infty} |v_k|^2 (\sum_{j=1}^{\infty} F_{k-j,j}(\frac{k-j}{k}) \mathbf{1}_{(j,\infty)}(k))^2 \\
&\geq \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} |v_k|^2 F_{k-j,j}^2 (\frac{k-j}{k})^2 \mathbf{1}_{(j,\infty)}(k) \\
&= \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} |v_k|^2 F_{k-j,j}^2 (\frac{k-j}{k})^2 \mathbf{1}_{(j,\infty)}(k) \\
&= \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=j+1}^{\infty} |v_k|^2 F_{k-j,j}^2 (\frac{k-j}{k})^2 \\
&\geq \sum_{k=j+1}^{\infty} |v_k|^2 F_{k-j,j}^2 (\frac{k-j}{k})^2 \\
&\geq \sum_{k=j+1}^{\infty} |v_k|^2 F_{k-j,j} \frac{k-j}{k}
\end{aligned}
$$

La últimas dos desigualdades se cumplen para todo $j \in \mathbb{N}$, luego $Dom(G) \subseteq \bigcap_{j\in\mathbb{N}} Dom(L_j)$

Un simple cálculo demuestra que (18) se cumple para todo $u, v \in D$ y por densidad se cumple para todo $u, v \in Dom(G)$. Esto permite construir el semigrupo dado en (20) para el generador definido como en (19). La markovianidad resulta al cumplirse la ecuación (18).

□

El lector interesado puede remitirse a [2], donde se trabaja con un proceso de muerte. Para este proceso también se demuestra la Markovianidad.

4.2. Dilatación clásica

Al igual que antes, se dilatará el espacio para trabajar con sistemas cuánticos abiertos con ruidos clásicos. Las demostraciones se harán de manera general y ocupando las mismas notaciones de antes, por razones que se evidenciarán más adelante. De este modo se tomará un espacio de Hilbert separable $\mathfrak{h}$ cualquiera y un espacio de probabilidad $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ dotado de una filtración $(\mathcal{F}_t)_{t\geq 0}$ (con las condiciones usuales) tal que existan $W^1, W^2, ...$

procesos de Wienner independientes. Sea $\mathcal{H} = \mathfrak{h} \otimes L^2_{\mathbb{C}}(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}) \cong L^2_{\mathfrak{h}}(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$, en este espacio se planteará la siguiente ecuación diferencial estocástica partiendo de $\xi \in Dom(G)$:

$$\xi_t = \xi + \int_0^t G\xi_s ds + \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^t L_j \xi_s dW_s^j \tag{21}$$

Donde G y L_j son operadores tal que $Dom(G) \subseteq \bigcap_{j=1}^{\infty} Dom(L_j)$ y

$$2\mathfrak{Re}\langle x, Gx\rangle + \sum_{j=1}^{\infty} ||L_j x||^2 = 0$$

Se puede demostrar la existencia y unicidad de la solución a la ecuación (21), para esto es necesario hacer las siguientes definiciones (cfr. [3]).

Definición 4.1 *Se dirá que $C : \mathfrak{h} \to \mathfrak{h}$, operador autoadjunto y positivo, satisface la hipótesis* (1) *si:*

1. $Dom(C) \subseteq Dom(G) \cap Dom(G^*)$

2. *Existe $(e_k)_{k\in\mathbb{N}}$ base ortonormal de $\mathfrak{h}$ tal que $\{e_k\}_{k\in\mathbb{N}} \subset Dom(C)$ y $\sum_{j\in\mathbb{N}} ||L_j^* e_k||^2 < \infty$ para todo $k \in \mathbb{N}$*

3. *Sea $P_n : \mathfrak{h} \to \mathfrak{h}_n = \langle e_1, ..., e_n\rangle$ la proyección, entonces existen α y $\beta \geq 0$ tal que*

$$2\mathfrak{Re}\langle Cx, CP_nGx\rangle + \sum_{j\in\mathbb{N}} ||CP_nL_jx||^2 \leq \alpha(||Cx||^2 + ||x||^2 + \beta)$$

   para todo $n \in \mathbb{N}$ y $x \in \mathfrak{h}_n$

4. $\sup\{||CP_nx|| : n \in \mathbb{N}\} \leq ||Cx|| \ \forall x \in Dom(C)$

Si C satisface (1) se define $\pi_C : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ como la identidad si $x \in Dom(C)$ y cero si no.

Definición 4.2 *Sea C satisfaciendo* (1) *y $\mathbb{T} = [0, \infty)$ o $[0, T]$ ($T \in [0, \infty)$). Se dirá que $(\xi_t)_{t\in\mathbb{T}}$ es solución C−fuerte de la ecuación diferencial estocástica cuántica si:*

1. *$(\xi_t)_{t\in\mathbb{T}}$ es un proceso adaptado que toma valores en $\mathfrak{h}$ con trayectorias continuas.*

2. *$\forall t \in \mathbb{T}$, $\mathbb{E}||\xi_t||^2 \leq ||\xi||^2$, $\xi_t \in Dom(C)$ $\mathbb{P}$-cs y $\sup\{\mathbb{E}||C \circ \pi_C(\xi_s)||^2 : s \in [0, t]\} < \infty$*

3. $\mathbb{P}$-cs y $\forall t \in \mathbb{T}$ se tiene:

$$\xi_t = \xi + \int_0^t G \circ \pi_C(\xi_s)ds + \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^t L_j \circ \pi_C(\xi_s)dW_s^j$$

Teorema 4.3 *Sea C satisfaciendo (1). Suponga que $\xi \in Dom(C)$, luego existe una única solución C-fuerte $(\xi_t)_{t\in\mathbb{T}}$ de la ecuación diferencial estocástica cuántica. Además*

$$\mathbb{E}||C\xi_t||^2 < \exp(\alpha t)(||C\xi||^2 + \alpha t(||C\xi||^2 + \beta))$$

Teorema 4.4 *Si las condiciones del teorema anterior se cumplen y $(\xi_t)_{t\in\mathbb{T}}$ es solución C-fuerte, entonces $\forall t \in \mathbb{T}$ se tiene $\mathbb{E}||\xi_t||^2 = ||\xi||^2$*

Para $\mathfrak{h} = l^2(\mathbb{N})$ y los operadores G y L_j definidos en la sección pasada se tiene:

Teorema 4.5 *Sea $C = -G$, entonces existe una única solución $(\xi_t)_{t\in\mathbb{T}}$ $C-$fuerte de la ecuación (21) partiendo de $\xi \in Dom(G)$, siempre y cuando $\sum_{j\in\mathbb{N}} F_{k,j} < \infty$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Para esta solución se tiene $\mathbb{E}||\xi_t||^2 = ||\xi||^2$.*

Demostración:

En la sección pasada se demostró que $Dom(G) \subseteq \bigcap_{j=1}^{\infty} Dom(L_j) = \mathfrak{h}$ (la condición $\sum_{j\in\mathbb{N}} F_{k,j} < \infty$ hace que los L_j sean acotados, pero nada se puede decir de G). Además para todo $x = \sum_{k=1}^{\infty} x_k e_k \in Dom(G)$ se tiene

$$2\Re\mathfrak{e}\langle x, Gx\rangle + \sum_{j=1}^{\infty} ||L_j x||^2 = -\sum_{k=1}^{\infty} |x_k|^2 c_k + \sum_{k=1}^{\infty} |x_k|^2 c_k = 0$$

Donde $c_k = \sum_{j=1}^{k-1} F_{k-j,j} \frac{k-j}{k}$. Es evidente que $C = -G$ es autoadjunto (G autoadjunto), $Dom(C) = Dom(G) = Dom(G^*)$ y $\langle x, Cx\rangle = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{\infty} |x_k|^2 c_k \geq 0$ (positivo). Al tomar $\{e_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ la base canónica, entonces $\{e_k\}_{k\in\mathbb{N}} \subset Dom(C)$ y $\sum_{j\in\mathbb{N}} ||L_j^* e_k||^2 = \sum_{j\in\mathbb{N}} F_{k,j} \frac{k}{k+j} < \sum_{j\in\mathbb{N}} F_{k,j} < \infty$.

Si $x = \sum_{k=1}^{n} x_k e_k \in \mathfrak{h}_n$, entonces $2\Re\mathfrak{e}\langle Cx, CP_n Gx\rangle = -\frac{1}{4}\sum_{k=1}^{n} |x_k|^2 c_k^3$ y

$$\begin{aligned}\sum_{j\in\mathbb{N}}||CP_nL_jx||^2 &= \frac{1}{4}\sum_{j=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{n}|x_k|^2F_{k-j,j}(\frac{k-j}{k})\mathbf{1}_{(j,\infty)}(k)c_{k-j}^2\\ &\leq \frac{1}{4}\sum_{k=1}^{n}|x_k|^2c_k^2\sum_{j=1}^{k-1}F_{k-j,j}\frac{k-j}{k}\\ &= \frac{1}{4}\sum_{k=1}^{n}|x_k|^2c_k^3\end{aligned}$$

Ya que $c_{k-j}\leq c_k$. Así se tiene que $2\mathfrak{Re}\langle Cx, CP_nGx\rangle + \sum_{j\in\mathbb{N}}||CP_nL_jx||^2 \leq 0$.

Por último, si $x\in Dom(C)$, entonces $||CP_nx||^2 = \frac{1}{4}\sum_{k=1}^{n}|x_k|^2c_k^2 \leq \frac{1}{4}\sum_{k=1}^{\infty}|x_k|^2c_k^2 = ||Cx||^2$ para todo $n\in\mathbb{N}$, luego $\sup\{||CP_nx|| : n\in\mathbb{N}\}\leq ||Cx||$ con lo que se prueba el teorema 4.5.

□

Se puede definir un proceso de operadores $(V_t)_{t\geq 0}$ con $V_t : Dom(G)\to L^2_{\mathfrak{h}}(\Omega,\mathcal{F},\mathbb{P})$ tal que $V_t\psi = \psi_t$ la única solución de (21) partiendo de $\psi\in Dom(G)$. Observar que $||V_t\psi||^2 = \mathbb{E}(||\psi_t||^2) = 1$ si $||\psi|| = 1$.

Se define el semigrupo $(\mathcal{T}_t)_{t\geq 0}$ sobre $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$ como

$$\langle\varphi, \mathcal{T}_t(X)\psi\rangle = \mathbb{E}(\langle V_t\varphi, XV_t\psi\rangle) = \langle\varphi_t, X\psi_t\rangle_{L^2_{\mathfrak{h}}(\Omega,\mathcal{F},\mathbb{P})} \tag{22}$$

Donde $\varphi,\psi\in Dom(G)$.

Teorema 4.6 *La colección de mapeos $(\mathcal{T}_t)_{t\geq 0}$ es un semigrupo dinámico cuántico Markoviano sobre $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$. Este semigrupo tiene como generador a $\mathcal{L}$.*

Demostración:

Al igual que antes, se puede demostrar que $|\langle\varphi, \mathcal{T}_t(X)\psi\rangle|\leq ||X||$ si $||\varphi|| = ||\psi|| = 1$ y tomando una sucesión $(\varphi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ en $Dom(G)$ tal que $\varphi_n\to\mathcal{T}_t(X)\psi$ ($Dom(G)$ es denso en $\mathfrak{h}$), entonces para todo $\psi \in Dom(G)$ con $||\psi|| = 1$ se tiene que $||\mathcal{T}_t(X)\psi||^2 \leq ||X||$. Luego $\mathcal{T}_t(X)$ se extiende de manera única a un operador acotado en $\mathfrak{h}$, con lo que se tiene $\mathcal{T}_t : \mathfrak{B}(\mathfrak{h}) \to \mathfrak{B}(\mathfrak{h})$. Repitiendo el cálculo del caso finito dimensional se tiene que $\langle \varphi, \mathcal{T}_s\mathcal{T}_t(X)\psi\rangle = \langle \varphi, \mathcal{T}_{t+s}(X)\psi\rangle$ para todo $\varphi, \psi \in Dom(G)$ y por densidad se tiene la propiedad de semigrupo. De manera análoga $\sum_{i,j=1}^{n} \langle \varphi_j, \mathcal{T}_t(X_j^* X_i)\varphi_i\rangle \geq 0$ para elementos en $Dom(G)$. Por densidad y el hecho de tener sumas finitas se tiene que las aplicaciones son completamente positivas. La normalidad se demuestra de manera similar al caso finito dimensional. La topología w^* coincide con la $\sigma-$débil en el caso infinito dimensional. Al tomar las sucesiones (φ_n) y (ψ_n) en $Dom(G)$ tal que $\sum_n ||\varphi_n||^2$, $\sum_n ||\psi_n||^2 < \infty$, entonces:

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty} |\langle \varphi_n, (\mathcal{T}_t(X) - X)\psi_n\rangle| &\leq \frac{||X||}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{E}(||\varphi_n - \varphi_n(t)||^2 + ||\psi_n - \psi_n(t)||^2) \\
&\leq ||X|| \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{E}(||\varphi_n||^2 + ||\psi_n||^2)
\end{aligned}$$

Por argumentos de densidad el semigrupo es w^*-continuo.

Se puede ocupar la fórmula de Ito para calcular

$$\begin{aligned}
d\langle \varphi_t, X\psi_t\rangle &= \langle d\varphi_t, X\psi_t\rangle + \langle \varphi_t, Xd\psi_t\rangle + \langle d\varphi_t, Xd\psi_t\rangle \\
&= \langle G\psi_t dt + \sum_{j=1}^{\infty} L_j\psi_t dW_t^j, X\psi_t\rangle + \langle \varphi_t, XG\psi_t dt + \sum_{j=1}^{\infty} XL_j\psi_t dW_t^j\rangle + \\
&\langle G\psi_t dt + \sum_{j=1}^{\infty} L_j\psi_t dW_t^j, XG\psi_t dt + \sum_{j=1}^{\infty} XL_j\psi_t dW_t^j\rangle \\
&= \mathcal{L}(X)(\varphi_t, \psi_t)dt + \sum_{j=1}^{\infty}(\langle L_j\psi_t, X\psi_t\rangle + \langle \varphi_t, XL_j\psi_t\rangle)dW_t^j
\end{aligned}$$

De esta manera

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi, \mathcal{T}_t(X)\psi\rangle \mid_{t=0} = \mathcal{L}(X)(\varphi, \psi)$$

Para todo $\varphi, \psi \in Dom(G)$. Notar que $\mathcal{L}(\mathbb{1})(\varphi, \psi) = 0$, lo que demuestra que $\mathcal{T}_t(\mathbb{1}) = \mathbb{1}$, por lo que el semigrupo dinámico cuántico es Markoviano.

4.3. Dilatación cuántica

Para la dilatación con ruidos cuánticos, se puede tomar el mismo espacio $\mathcal{F}$ de antes y plantear en los operadores de $\mathcal{H} = l^2(\mathbb{N}) \otimes \mathcal{F}$ la ecuación

$$V_t = \mathbb{1} + \sum_{\alpha,\beta\geq 0} \int_0^t V_s G^\alpha_\beta d\Lambda^\beta_\alpha(s) \tag{23}$$

Donde $G^0_0 = G$, $G^0_j = L^*_j$, $G^j_0 = L_j$ si $j \geq 1$ y $G^\alpha_\beta = 0$ en otro caso.

Los resultados en [16] son bastante generales, luego para garantizar la existencia y unicidad de la ecuación diferencial estocástica sólo debe cumplirse que $\sum_{\beta\geq 0} ||G^\alpha_\beta u||^2 \leq c(\alpha)^2||u||^2$.

Teorema 4.7 *La ecuación (23) admite una única solución si* $\sum_{j\in\mathbb{N}} F_{k,j}\frac{k}{k+j} < c$ *para todo* $k \in \mathbb{N}$ *y* $\sup_{k\in\mathbb{N}} \sum_{j=1}^{k-1} F_{k-j,j}\frac{k-j}{k} < \infty$.

Demostración:

Primero se debe observar que tanto los operadores L_j como G son acotados, ya que

$$\begin{aligned} ||L_j x||^2 &= \sum_{k=j+1}^{\infty} |x_k|^2 F_{k-j,j}\frac{k-j}{k} \\ &\leq ||x||^2 c \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} ||Gx||^2 &= \frac{1}{4}\sum_{k=1}^{\infty} |x_k|^2 (\sum_{j=1}^{k-1} F_{k-j,j}\frac{k-j}{k})^2 \\ &\leq (\sup_{k\in\mathbb{N}} \sum_{j=1}^{k-1} F_{k-j,j}\frac{k-j}{k})^2||x||^2 \end{aligned}$$

Por lo anterior, el único caso interesante a analizar de la desigualdad $\sum_{\beta\geq 0} ||G^\alpha_\beta u||^2 \leq c(\alpha)^2||u||^2$ es cuando $\alpha = 0$. Esto queda

$$
\begin{aligned}
\sum_{\beta\geq 0} ||G^{\alpha}_{\beta}x||^2 &= \sum_{j=1}^{\infty} ||L_j^* x||^2 + ||Gx||^2 \\
&\leq \sum_{j=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty} |x_k|^2 F_{k,j}\frac{k}{k+j} + ||G||^2||x||^2 \\
&\leq ||x||^2(||G||^2 + c)
\end{aligned}
$$

□

Esta solución es un cociclo unitario ya que, como se vió en la sección pasada, $\theta_{\mathbb{G}}(\mathbb{1}) = \theta_{\mathbb{G}^\dagger}(\mathbb{1}) = 0$ para un subespacio denso D de $\mathfrak{h}$.

Observación: Se puede demostrar que la ecuación

$$V_t^* = \mathbb{1} + \sum_{\alpha,\beta\geq 0}\int_0^t (G^{\beta}_{\alpha})^* V_s^* d\Lambda^{\beta}_{\alpha}(s) \tag{24}$$

también tiene una única solución (cfr. [16]). Con esto se puede construir un flujo (colección de homomorfismos) sobre los operadores acotados de $\mathcal{H}$ de la forma:

$$k_t(X) = V_t^* X V_t \tag{25}$$

Al tomar la proyección $E : \mathcal{H} \to \mathfrak{h}$ tal que $E(ue(f)) = ue(0)$ se puede construir un semigrupo sobre $\mathfrak{B}(\mathfrak{h})$ como

$$\mathcal{T}_t(X) = Ek_t(X)E^* \tag{26}$$

Al igual que en el caso finito dimensional, se puede demostrar que éste es un semigrupo dinámico cuántico markoviano que tiene como generador a $\mathcal{L}$.

5. Comentarios Finales

A lo largo de esta tesis se ha estudiado la ecuación de fragmentación de Smoluchowski, que nace del equilibrio de masa de primer orden. Se demostró que ésta es la que determina la evolucion de las leyes marginales de un proceso Markoviano, es decir el estado del sistema. La consturcción del proceso estocástico permite la apertura del sistema, el ambiente donde se puede estudiar la disipación de energía producto del medio. Esta apertura o dilatación permite, entre otras cosas, determinar la evolución de los observables del sistema y su simulación. Un ejemplo clásico de este fenómeno se encuentra en el proceso de molienda de mineral de cobre, donde el observable es la energía utilizada en el proceso (cfr. [1]).

Encontrando el semigrupo correspondiente a los observables del proceso, es posible cuantizar la ecuación de fragmentación de Smoluchowski a través del generador. Esto permite tener una visión al fenómeno de fractura microscópico que ocurre por ejemplo en la cromodinámica. Para este generador es posible encontrar el semigrupo que determina la evolución de los observables del sistema, pero también es posible encontrar el que determina la dinámica de los estados. Este semigrupo es llamado predual (cfr. [16]) ya que actúa sobre los operadores clase traza.

Se planteó además la apertura del sistema cuántico, lo que permite analizar la interacción del medio con la partícula. Esta dilatación se hizo de manera clásica y cuántica en el caso finito e infinito dimensinal. Para encontrar el semigrupo minimal no es necesario imponer condiciones sobre los $F_{i,j}$ en general. Para la dilatación con ruidos cuánticos se debe tener mayor control que la que se pide en el caso clásico, pidiendo una cota uniforme para $\sum_{j\in\mathbb{N}} F_{k,j}$.

Se vió cómo dar una interpretación clásica al fenómeno de fractura cuántico, al restringirse a un álgebra abeliana invariante bajo la acción del semigrupo. Unas de las preguntas a responder es ¿existirá otra algebra abeliana invariante? Si la respuesta fuese afirmativa, entonces se podrían relacionar los parámetros de dos procesos clásicos distintos. Sin duda, encontrar otra álgebra invariante sería muy interesante en la linea de esta investigación.

Muchas preguntas se abren con el desarrollo de esta tesis, como por ejemplo ¿se podrá recuperar la ecuación (3) de pérdida-ganancia de la cromodinámica? Bajo este marco conceptual no existen diferencias entre el caso discreto y el continuo en el siguiente sentido: se podría cambiar el espacio $l^2(\mathbb{N})$ por $L^2(\mathbb{R}, \mu(dx))$ con alguna base numerable adecuada. A través de la isometría usual (la que envía elementos de una base en la otra) se debería pasar del caso discreto al continuo.

Una pregunta muy importante es analizar si el modelo se ajusta de manera correcta a los datos experimentales, para esto es necesario obtener una expresión para la energía disipada del sistema.

Por último, y sólo por dar una lista corta de preguntas que se abren con este tema, un estudio interesante es analizar qué ruido clásico da una mejor interpretación del fenómeno, ya que estos intuitivamente son procesos discontinuos y deben modelarse como tal. Una posibilidad es usar un proceso de Poisson marcado con alguna intensidad que se ajuste a la evolución de los estados.

Muchas preguntas quedan abiertas, pero al menos se ha introducido un marco conceptual que puede ayudar a futuras investigaciones relacionadas con el tema.

Referencias

[1] T. Neumann (2007). *Un Modelo Estocástico del Proceso de Molienda de Minerales de Cobre, Basado en la Ecuación de Smoluchowski.* Memoria de Título, Pontificia Universidad Católica de Chile.

[2] L. Accardi, F. Fagnola, S. Hachicha (2006) *Generic q-Markov Semigroups and Speed of Convergence of q-Algorithms.* Infinite Dimensional Analysis Quantum Probability and Related Topics.

[3] C. Mora, R. Rebolledo (2006). *Regularity of Solutions to Linear Stochastic Schrödinger Equations.*

[4] Bertoin, J. Martínez (2005). *Fragmentation Energy.* Applied Probability Trust.

[5] B. Jourdain (2004). *Uniqueness via Probabilistic Interpretation for the Discrete Coagulation Fragmentation Equation.* Communications in Mathematical Sciences.

[6] L. Karpivsky, E. Ben-Naim, I. Grosse (2004). *Stable Distributions in Stochastic Fragmentation.* Journal of Physics A: Mathematical and General.

[7] M. Deaconu, N. Fournier, E. Tanré (2003). *Rate of Convergence of a Stochastic particle system for the Smoluchowski coagulation equation.* Methodology and Computing in Applied Probability.

[8] M. Deaconu, N. Fournier y E. Tanré (2002). *A Pure Jump Markov Process Associated with Smoluchowski's Coagulation Equation.* The Annals of Probability.

[9] A. Eibeck, W. Wagner (2001). *Stochastic particle approximations for Smoluchowski coagulation equation.* The Annals of Applied Probability.

[10] V. Berezinsky, M. Kachelrieb (2000). *Monte Carlo Simulation for Jet Fragmentation in SUSY-QCD.* Arxiv.

[11] M. Deaconu y E. Tanré (2000). *Smoluchowski's Coagulation Equation: Probabilistic Interpretation of Solutions for Constant, Additive and Multiplicative Kernels.* Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa Scienze Fisiche e Matematiche.

[12] A. S. Holevo (1996). *Stochastic Differential Equations in Hilbert Space and Quantum Markovian Evolutions.* Probability Theory and Mathematical Statistics Tokyo. pp. 122-131.

[13] A. S. Holevo (1996). *On Dissipative Stochastic Equations in a Hilbert Space.* Probab. Theory Related Fields. pp. 483-500.

[14] R. Peschanski (1993). *Quantum Fragmentation.* Arxiv.

[15] L. Dokshitzer, A. Khoze, A. Mueller, S. Troyan (1991). *Basics of Perturbative QCD.* Frontieres. pp. 43-52.

[16] S. Attal, F. Fagnola, R, Rebolledo, L. Rey-Bellet. *Open Quantum Systems II, The Markovian Approach.* Springer. pp. 149-218.

[17] S. Attal. *Operator Algebras Methods in Quantum Open Systems.* pp. 5-42.

[18] R. Ash. *Probability and Measure Theory.* Harcourt. pp. 420.

[19] P. Brémaud *Point Processes and Queues.* Springer Verlac. pp. 87, 233-241, A1-290-A1-295.

[20] B. Oksendal. *Stochastic Differential Equations.* Springer. pp. 68.

[21] P. Protter. *Stochastic Integration and Differential Equations.* Springer Verlac. pp. 71.