



Entre química y matemática: el rol de la teoría de modelos

Andrés Villaveces - *Universidad Nacional de Colombia - Bogotá*
UNeMat⁵ - Universidad Nacional - Bogotá, junio de 2018

TEMAS

Preguntas químicas, de naturaleza lógica

Teoría de modelos de la física

El problema con los estados propios

Cuatro caminos

Oxford: Zilber - haz de Weyl, estructuras de aproximación

Helsinki: ultraproductos métricos

Toronto: Bays y Hart - representaciones.

Bogotá: Ochoa-V. Haces métricos y distribuciones.

Teoría de modelos y química

LAZOS MÚLTIPLES Y PROYECTOS LATERALES (?)

Primera presentación ante matemáticos de estos temas. (Antes, ante Químicos Matemáticos - Leipzig, Max Planck, 2016.)

Seminario Lógica y Geometría - Universidad Nacional

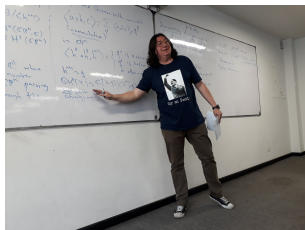
Los colegas en la UN, Alexander Cruz y Leonardo Cano, Fernando Zalamea

Los colegas más lejanos, Boris Zilber, Åsa Hirvonen, Tapani Hyttinen

Los químicos José Luis Villaveces, Guillermo Restrepo, Maicol Ochoa

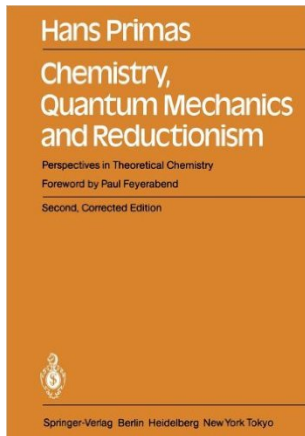
El estudiante Nicolás Medina

ENCUENTROS EN LA UN - LA UN EN LA PLAZA



LATERALIDAD - LEER A HANS PRIMAS

En su libro de 1983 Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism el químico suizo Hans Primas manifiesta su seria inconformidad con varias preguntas fundamentales de la química teórica.



PREGUNTAS “LÓGICAS” EN UN LIBRO DE QUÍMICA TEÓRICA

Primas abre su libro con un primer capítulo en tono provocador llamado Open Problems of Present-Day Theoretical Chemistry. Allí elabora una lista muy llamativa al ser leída en tono matemático, con subtemas como la “sobreproducción de verdad”, “teorías químicas”, el problema de “calcular todo”, y algunas cuestiones difíciles de la mecánica cuántica molecular.

OBSERVACIONES CÁUSTICAS DE PRIMAS (I) - 1982

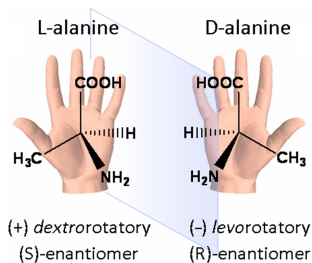
- ▶ Jauch: los observables clásicos (observables “esenciales”) son el eslabón perdido entre la física y la química - 1970
- ▶ Ernest Becker: Y aquí estamos, a finales del siglo XX, ahogándonos en la verdad.
- ▶ Aún así, el monismo de la física newtoniana simplemente ha sido reemplazado por un nuevo monismo dirigido por la ecuación de Schrödinger
- ▶ ¡Podemos calcular la energía de enlace sin siquiera saber qué es un enlace!
- ▶ ... un peligro olvidar el ímpetu original de nuestra empresa: entender el comportamiento de la materia
- ▶ ... la mecánica cuántica numérica es una herramienta supremamente poderosa en la química pero no puede reemplazar el pensamiento...

LO ESENCIAL DE LAS PREGUNTAS DE PRIMAS

- ▶ ¿Aplica la mecánica cuántica a sistemas moleculares grandes?
- ▶ ¿Es universalmente válido el principio de superposición?
Aunque esta pregunta es realmente clásica en física, Primas da una versión molecular de la misma:
- ▶ ¿Por qué tantos estados estacionarios no existen? De hecho, dice Primas, ¡incluso sistemas moleculares relativamente pequeños no exhiben estados estacionarios permitidos por la química cuántica tradicional!

UN EJEMPLO EXTRAÑO (DE PRIMAS) - QUIRALIDAD

¿Por qué se puede comprar en la farmacia *D*-alanina (con vector estado $|\Psi_D\rangle$), *L*-alanina (con vector estado $|\Psi_L\rangle$) y la mezcla racémica (operador de densidad $|\Psi_D\rangle\langle\Psi_D| + |\Psi_L\rangle\langle\Psi_L|$), pero no las superposiciones coherentes $(|\Psi_D\rangle + |\Psi_L\rangle)$ y $(|\Psi_D\rangle - |\Psi_L\rangle)$? Esto es paradójico, pues según la visión tradicional, los dos últimos estados mencionados representan el estado base y un estado excitado, respectivamente. Este ejemplo señala una situación aparentemente frecuente en química, no reducible a la mera explicación física.



- ▶ ¿Por qué la mecánica cuántica falla al describir sistemas químicos? Esta pregunta es una variante molecular de la famosa pregunta más fundamental de Einstein ¿Por qué están localizados los cuerpos macroscópicos?
- ▶ ¿Es la temperatura un observable? Esta pregunta apunta a otro tipo de situación paradójica: aunque existen muchos sistemas en equilibrio que tienen una temperatura bien definida (se puede medir, usando un sistema simple que, dice Primas, se puede implementar con perturbaciones arbitrariamente pequeñas del estado termodinámico del sistema), la mecánica cuántica estadística tradicional no provee un observable (operador auto-adjunto que actúa sobre un espacio de Hilbert de estados) que represente la temperatura para un sistema simple.

PRIMAS SE ACERCA A PREGUNTAS DE CARÁCTER LÓGICO...

- ▶ ¿Realmente vale la mecánica cuántica en sistemas moleculares **grandes**?
- ▶ ¿Es universalmente válido el principio de superposición?
- ▶ El principal obstáculo para el desarrollo de una teoría de sistemas moleculares grandes y complejos no es computacional sino conceptual...
- ▶ Una buena teoría debe ser CONSistente, CONFirmada e INTuible.

MÁS POLÉMICAS

- ▶ estructura de las teorías científicas (“una buena teoría debería ser consistente, confirmada e intuible”),
- ▶ la mecánica cuántica “pionera” y su interpretación (énfasis fuerte en las correlaciones de Einstein-Podolsky-Rosen, que han generado buena parte de lo más interesante entre matemática y física),
- ▶ la mecánica cuántica más allá de la etapa pionera (una visión más algebraica de la mecánica cuántica, y también lógica cuántica, teoría de la probabilidad no booleana).
- ▶ introduce una lógica de propiedades químicas que extiende la lógica temporal ortonormal y su interpretación óptica - da la W^* -lógica de la química (basada en las W^* -álgebras de von Neumann).

MÁS RECIENTEMENTE, POCO POCO... EN QUÍMICA TEÓRICA - SEGÚN J. MATH. CHEM. 2017 - MAX PLANCK LEIPZIG



- ▶ Métodos numéricos computacionales,
- ▶ Big data, data mining,
- ▶ Teoría de grafos, dendrogramas,
- ▶ Redes,
- ▶ Teoría de nudos
- ▶ Información cuántica...
- ▶ ¡Pero las preguntas de Primas siguen en gran medida abiertas aún!

TEORÍA DE MODELOS DE LA FÍSICA



TEORÍA DE MODELOS Y FÍSICA

La teoría de modelos interactúa con la física cuántica de manera intensa y peculiar desde hace unos pocos años.

En realidad, hay interacciones con la lógica matemática de manera más general, a través de teoría de la teoría de topoi y la lógica categórica en trabajos de Isham y Doering, pero de esa vertiente no nos ocupamos aquí.

EL PROBLEMA CON LOS ESTADOS PROPIOS

- ▶ Hasta ahora: partícula libre y en el caso del oscilador armónico cuántico y el cálculo de sus propagadores cuánticos... (¡mucho más sencillo que lo que interesa a los químicos!)
- ▶ Aunque estos modelos son clásicos para la mecánica cuántica, los cálculos concretos de los propagadores requieren calcular integrales de camino de Feynman.
- ▶ Observables físicos: operadores auto-adjuntos sobre un espacio de Hilbert complejo (típicamente de dimensión infinita).
- ▶ Estados del sistema: esfera unitaria. Resultados de las mediciones: valores propios de esos operadores.

EL PROBLEMA CON LOS ESTADOS PROPIOS

Si un operador auto-adjunto tiene valores propios no degenerados, los vectores propios correspondientes serán ortogonales y tendrán valores propios reales.

Los físicos usualmente pasan aquí a lo que llaman “insertar un conjunto completo de estados”: lograr que los vectores propios de los operadores considerados generen todo el espacio.

Superposiciones = combinaciones lineales de los vectores propios - coeficientes de las combinaciones lineales: las probabilidades de colapso en el estado propio correspondiente “cuando se lleva a cabo la medición”.

PROBLEMAS

Hasta aquí todo muy bien.

Pero si enfocamos en el caso más simple posible, una partícula libre (por ejemplo en espacio unidimensional), la hipótesis de completitud del conjunto de estados entra en conflicto con trabajar en un espacio de Hilbert separable (con base enumerable). En ese caso, el operador de posición no tiene vectores propios.

Varias "soluciones" usadas por los físicos matemáticos (espacio de Hilbert "equipado"/rigged, o directamente estudiar regiones del espectro compatibles con la medición... o reemplazar el trabajar realmente con vectores propios por trabajar con funciones de onda que proveen una distribución de probabilidad para la posición de la partícula).

EL OPERADOR DE EVOLUCIÓN TEMPORAL ES EN TODO ESTE
CONTEXTO LA SOLUCIÓN A LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K^t = \mathbf{H} K^t,$$

DONDE \mathbf{H} ES EL HAMILTONIANO DEL SISTEMA (EL OPERADOR
DE ENERGÍA), Y K^t ES EL OPERADOR UNITARIO DE
EVOLUCIÓN TEMPORAL QUE PROVEE EL ESTADO $K^t(\phi)$ SI EL
ESTADO EN TIEMPO 0 ES ϕ .

PROPAGADOR Y EVOLUCIÓN TEMPORAL.

Para dar esta evolución temporal, hay que calcular el propagador $K(x, y, t)$ (la amplitud de probabilidad de la partícula al viajar esta del punto x al punto y en tiempo t).

Si tuviéramos estados propios bona fide $|x\rangle, |y\rangle$ que correspondieran a las posiciones, esta amplitud de probabilidad estaría dada por el producto interno $\langle y|K^t|x\rangle$. Pero como en muchos casos no se tiene directamente el estado propio, el propagador termina siendo calculado como el núcleo de la representación integral del operador de evolución temporal, $(K^t\psi)(y) = \int_{\mathbb{R}} K(x, y, t)\psi(x)dx$.

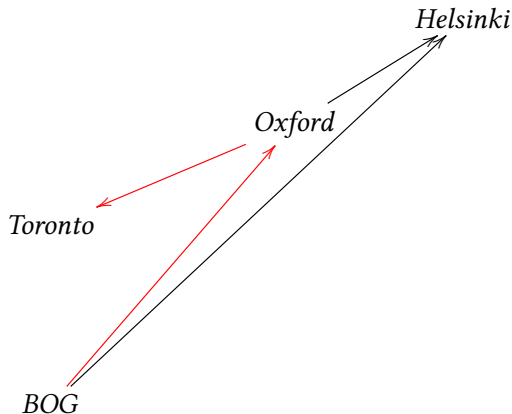
El paso crucial siguiente es lograr un valor entero para el propagador usando integrales de camino de Feynman.

CUATRO CAMINOS

Los problemas arrancan ahí, y los caminos de solución aportados por la teoría de modelos divergen en cuatro vías a partir de este punto.



4 CAMINOS HASTA AHORA



OXFORD: ZILBER - HAZ DE WEYL, ESTRUCTURAS DE APROXIMACIÓN

Zilber (desde 2011): “teoría de aproximación estructural” (modelo-teórica) busca dar un marco para los problemas mencionados arriba

- ▶ espacios de Hilbert de dimensión finita como aproximaciones al estado de Hilbert realmente deseado.
- ▶ Este último tiene un parámetro real asociado al par de operadores posición Q y cantidad de movimiento P (tales que $Qf(x) = xf(x)$ y $Pf(x) = -i\hbar(df/dx)(x)$ - los operadores tienen conmutador $[Q, P] = i\hbar$ - y también a los operadores unitarios asociados a estos, $U^t = e^{itQ}$ y $V^t = e^{itP}$ (aquí la ley de conmutación es la de Weyl, $V^w U^t = e^{ihtw} U^t V^w$ para muchas instancias de t y w).

ZILBER - BLURRING

En 2016, Zilber desarrolló en detalle su construcción mediante una combinación de lo siguiente:

- ▶ Un haz de estructuras, cada una asociada a una representación finito-dimensional (!) del álgebra de operadores, y atada a un par de números racionales (que “aproximan” el número real que controla la conmutación).
- ▶ Inmersiones entre estas estructuras.
- ▶ Un límite de estas estructuras que interpreta Zilber como un ultraproducto y luego una imagen homomorfa de este.

BLURRING

Zilber da varias descripciones de su proceso. Una de estas me parece particularmente relevante a las preguntas más difíciles de la química: según Zilber el universo tendría un número de partículas finito, pero tan grande que cierta “desenfoque” (blurring) que ocurre por verlo desde la distancia coincide con la imagen que tienen varios físicos o químicos cuánticos. Las estructuras de aproximación requieren escoger con cuidado el homomorfismo del segundo paso - y los haces (y prehaces) permiten entender esto.

HELSINKI: HIRVONEN Y HYTTINEN - ULTRAPRODUCTOS MÉTRICOS

Otro enfoque: usar directamente teoría de modelos más “clásica”: ultraproductos métricos de modelos estándar de la física sobre espacios de Hilbert de dimensión finita $M_N = (H_N, +, \langle | \rangle_N, \Psi)$, sumergidos dentro de ultraproductos clásicos:

$$\prod_N^d M_N / U^d \subset \prod_N M_N / U.$$

El problema de los vectores propios “no existentes” se ataca escogiendo cuidadosamente los ultrafiltros de manera que el límite resulte corresponder a un natural no estándar divisible por todos los naturales estándar.

HELSINKI: HIRVONEN Y HYTTINEN - ULTRAPRODUCTOS MÉTRICOS

Este enfoque comparte con el de Zilber el aproximar el espacio de Hilbert de dimensión infinita mediante subespacios de dimensión finita, pero a diferencia de Zilber, ellos hacen básicamente dos tipos de ultraproducto: uno clásico y otro métrico. El métrico no tiene infinitesimales ni infinitos (el clásico sí). Además, arman el ultrafiltro usando teoría de números para ir logrando en el límite un número N (que Zilber suele interpretar como un número finito pero gigantesco, asociado tal vez al número de partículas del universo físico) hiperfinito y muy divisible (básicamente, divisible por todos los números naturales). Al igual que Zilber, tienen que lidiar con renormalización.

TORONTO: BAYS Y HART - REPRESENTACIONES.

En 2016, construyendo sobre los trabajos de Zilber, Martin Bays y Bradd Hart enfocan dos temas: lograr la representación de Schrödinger del álgebra tridimensional de Heisenberg de distribuciones temperadas como ultralímite de representaciones finito-dimensionales de subgrupos del grupo de Heisenberg. Para ésto, utilizan el espacio de Schwarz y la teoría de distribuciones, y hacen un uso sofisticado de la teoría de la representación.

BOGOTÁ: OCHOA-V. HACES MÉTRICOS Y DISTRIBUCIONES.

Con Maicol Ochoa (químico, actualmente en Filadelfia) hemos tomado un enfoque un poco distinto de los anteriores, pero con mucho puntos en común que quiero señalar.

Arrancamos (en [OcViLog]) generalizando las construcciones de Caicedo de haces de estructuras a haces métricos, y encontramos condiciones para la existencia de “límites” de estos haces (modelos genéricos) con buen comportamiento. Esto nos da un marco lógico general que tiene las siguientes propiedades:

- ▶ Es una estructura natural de aproximación topológica (dada directamente por la estructura de haz.
- ▶ Las fibras de dicho haz son estructuras métricas en el sentido de Henson-Iovino. Los espacios de Hilbert, de Schwartz, etc. viven de manera natural sobre estas fibras.
- ▶ En los casos buenos, tenemos el modelo genérico y el teorema del modelo genérico nos permite transferir algunas propiedades.

MODELO GENÉRICO MÉTRICO

Para una noción apropiada de genericidad, construimos el modelo genérico métrico (“límite métrico” de modelos estándar de la física)

Teorema (Modelo genérico métrico)

Dado F un filtro genérico sobre X un espacio topológico, \mathfrak{A} un haz de estructuras métricas sobre X y secciones $\sigma_1, \dots, \sigma_n$. Entonces

1. $\mathfrak{A}[F] \models \varphi([\sigma_1]/\sim_F, \dots, [\sigma_n]/\sim_F) < \varepsilon \iff \exists U \in F$ such that $\mathfrak{A} \Vdash_U \varphi(\sigma_1, \dots, \sigma_n) < \varepsilon$
2. $\mathfrak{A}[F] \models \varphi([\sigma_1]/\sim_F, \dots, [\sigma_n]/\sim_F) > \varepsilon \iff \exists U \in F$ tal que $\mathfrak{A} \Vdash_U \varphi(\sigma_1, \dots, \sigma_n) > \varepsilon$

DISTRIBUCIONES DE SCHWARTZ Y GAUSSIANAS

En un segundo paso,

- ▶ Usamos distribuciones de Schwartz y gaussianas sobre las fibras - fibras que modelas lo suficiente para usar dualidad y cálculo de distribuciones.
- ▶ Usamos propiedades algebraicas de las integrales involucradas en las funciones gaussianas, y sus productos con polinomios, en lugar de calcular integrales.
- ▶ Luego logramos versiones “físicas” de los productos internos \langle, \rangle_U y \langle, \rangle_V asociados a los operadores y capturamos las propiedades de las integrales directamente ahí (y en sus transformadas de Fourier).
- ▶ Usamos transformada de Fourier en las fibras para representar el operador $e^{it\hat{p}^2}$ como un operador de multiplicación en el espacio de cantidad de movimiento.

DE NUEVO, LA QUÍMICA

Sistemas moleculares complejos: probablemente no se pueden reducir a sistemas simples como los de los dos problemas de física hasta ahora tratados por los cuatro grupos.

¿Qué se puede transferir a las preguntas de Primas?

Por un lado, emerge en el trabajo de Zilber la métrica solamente al pasar al límite.

No se toma un límite de espacios métricos (como en nuestro trabajo con Ochoa).

La manera como emerge esa métrica en el límite es aún un misterio - acaso no completamente distinto de la emergencia de propiedades en sistemas químicos. La pregunta de Primas ¿es la temperatura un observable? podría ser llevada a estructuras de aproximación, o a haces métricos adecuados.

DE NUEVO, LA QUÍMICA

- ▶ El famoso modelo ab initio parece ser un candidato natural a ser entendido mediante métodos distintos. Se trata de un problema de aproximación, en la superficie mucho más complejo que los de partículas libres u osciladores armónicos cuánticos. Aún así, conjeturo que un análisis más contemporáneo matemáticamente hablando podría aportar luces interesantes. No estoy seguro de que sea un problema lógico o modelo-teórico.
- ▶ El primer problema de Primas (¿Aplica la mecánica cuántica a sistemas moleculares grandes?) es muy cercano a la visión de Zilber - aunque en el caso de Zilber la representación aún sirve para casos muy “simples” desde el punto de vista de la química: partícula libre, oscilador armónico cuántico.
- ▶ Sobre el principio de superposición y su conexión con el entrelazamiento cuántico, de nuevo hay trabajos debidos a Abramsky y Brandemburger.

CODA: ¿POR QUÉ TEORÍA DE MODELOS?

Más allá de las definiciones clásicas

- ▶ Keisler (1970): model theory = logic + universal algebra
- ▶ Hodges (1993): model theory = algebraic geometry – fields
- ▶ Hrushovski (2006): model theory: the geography of tame mathematics

(La teoría de modelos como la relación entre clases de estructuras y sus posibles axiomatizaciones, emerge el siguiente panorama:

CODA: ¿POR QUÉ TEORÍA DE MODELOS?

- ▶ Generalización de ciertas partes de la geometría algebraica (¿diferencial también?)
- ▶ Aisla nociones apropiadas de genericidad, elementos imaginarios - en cierto sentido, se comporta como una teoría de Galois muy generalizada.
- ▶ La teoría de modelos aísla la noción (extrema) de categoricidad (¿cuándo una axiomatización, una descripción de un fenómeno del mundo, es “perfecta”?) y luego da toda una
- ▶ filtración de la categoricidad a través de jerarquías (“estabilidad” modelo-teórica) de todas las teorías matemáticas posibles. Detecta invariantes nuevos entre estas.

MÁS RECIENTEMENTE...

Aunque la teoría de modelos nace como parte (y es) lógica matemática (Gödel, Tarski, etc.) su desarrollo ha estado en gran parte en diálogo con el resto de la matemática (Robinson, Ax-Kochen, luego Shelah, Hrushovski, Zilber, etc.) y se ha ido acercando a temas como geometría no-commutativa (el “cuerpo de un elemento” \mathbb{F}_1 , haces de álgebras de Weyl), invariantes asociados a teoría de números y física (función modular j , etc.)... y como vimos antes

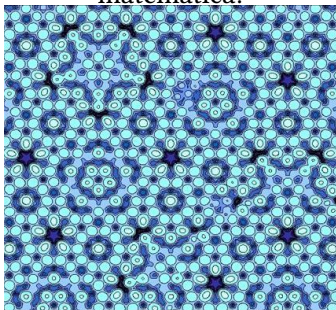
la teoría de modelos de la física - vía la geometría no conmutativa, invariantes modulares, teoría de modelos de álgebras de operadores (tesis doctoral de Argoty con Berenstein y V. en C^* -álgebras, W^* -álgebras), etc.

LA FINAL

¡Mil gracias a estudiantes, participantes, conferencistas!

Y que el UNeMAT realmente genere unión

¡Y vale la pena leer más allá de nuestra (obviamente bellísima)
matemática!



Superficie potencial de energía para plata al depositarse en una superficie cuasicristal de aluminio-paladio-manganeso (Al-Pd-Mn).