

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

SIMETRÍA INFINITESIMAL DE LEGENDRE EN LA MÉTRICA DEL ESPACIO FASE DE LA TERMODINÁMICA

> TESIS QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: MAESTRO EN CIENCIAS FÍSICAS

> > PRESENTA: DAVID GARCÍA PELÁEZ CRUZ

DIRECTOR DE TESIS DR. HERNANDO QUEVEDO CUBILLOS ICN, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR DR. JERÓNIMO ALONSO CORTEZ QUEZADA *FC, UNAM* DR. ERICK LEONARDO PATIÑO JÁIDAR *FC, UNAM*

MÉXICO, D. F. ENERO 2015



Universidad Nacional Autónoma de México



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.

Contents

1.	Con	tents	2
2.	Intr	oducción	4
3.	Geo	metría de contacto	10
	3.1.	Variedades de contacto.	11
		3.1.1. Coordenadas y sub-variedades integrables	12
	3.2.	Transformaciones de contacto	14
	3.3.	Variedades de contacto con métrica	16
4.	Geo	metrotermodinámica	19
	4.1.	La termodinámica	19
	4.2.	Fundamentos de la Geometrotermodinámica	21
5.	Pro	blema central	27
	5.1.	Transformaciones de Legendre y Hamiltonianos de contacto	28
	5.2.	Isometrías infinitesimales de Legendre	32
	5.3.	Interpretación termodinámica: Gas ideal	36
	5.4.	Métrica a partir de una estructura de contacto	38
	5.5.	Más dimensiones	45
		5.5.1. Sistemas con 3 grados de libertad	46
		5.5.2. Sistemas con 4 grados de libertad	46
		5.5.3. Sistemas de n grados de libertad	47

6.	Conclusiones	49
7.	Apéndice	55

 $\mathbf{2}$

Introducción

En la vida cotidiana nos encontramos e interactuamos con sistemas macroscópicos. Estos sistemas se comportan de tal forma que pueden ser descritos como un todo, sin importar en principio, los elementos que lo compongan. La termodinámica es la rama de la física que se encarga de estudiar este tipo de sistemas de una manera muy general y extensa, independientemente de las teorías más específicas. Es por esto que la termodinámica se puede aplicar a la mayoría de los campos de la física [1].

La termodinámica pertenece a la llamada física clásica, pues nos permite acercarnos a los sistemas a través de su fenomenología. Esta rama de la física evita el uso explícito de conceptos como el átomo o las moléculas para describir un sistema, y en vez, lidia con relaciones entre cantidades abstractas tales como la energía, la entropía, y la temperatura entre otras. La simplicidad de la lógica de la termodinámica nos permite ver de manera más clara la física de algunos sistema a partir de principios bastante generales [2].

El objetivo de la termodinámica, es poder encontrar variables apropiadas que puedan modelar macroscópicamente un sistema, además de poder relacionar estas variables por medio de ecuaciones generales. A estas relaciones se les conoce como ecuaciones de estado y a las ecuaciones generales se les llama leyes de la termodinámica. Las ecuaciones de estado se generan a partir de conocimiento empírico, y son válidas más allá del sistema específico que estudien. Para describir un sistema, no es necesario conocer todas sus variables, es suficiente con poder especificar ciertas variables relevantes, llamadas variables de estado, para que las demás queden definidas. No es objeto de la termodinámica validar la ecuación de estado de un sistema particular, sino partir de ella y generar información acerca de las variables de estado. [1]. Algunas de las leyes de la termodinámica se generaron a través de principios mucho más básicos, adaptándolos al contexto de los sistemas termodinámicos. Este es el caso de la primer ley de la termodinámica, la cuál, es simplemente el principio de conservación de la energía, escrita para un sistema termodinámico capaz de intercambiar energía, trabajo y calor con los alrededores. En este contexto, tanto el cambio del calor como el del trabajo dependen de la forma en que se realice dicho intercambio y este concepto quedará representado por medio de las *diferenciales inexactas*.

Históricamente, el desarrollo de la termodinámica, al igual que muchas ramas de la física, se basó completamente en hechos empíricos. En un principio, ninguna de sus leyes se podía remitir a un concepto matemático abstracto que diera sustento a la teoría sin la parte fenomenológica. Como respuesta a este hecho, Caratheodory propuso la llamada *termodinámica axiomática*, que intentaba construir la termodinámica a partir de postulados abstractos o axiomas y no de aspectos empíricos. A lo largo del tiempo, se ha intentado encontrar un sustento matemático que pueda reproducir las leyes fenomenológicas. En años recientes, la geometría diferencial ha tomado un papel relevante en la teoría y se perfila como candidata para reproducir estas leyes fenomenológicas.

En los últimos años, se ha intentado formular la mayor parte de las teorías físicas en un lenguaje geométrico, tales como la relatividad general, el electromagnetismo, la mecánica clásica, entre otras. En todos estos casos, el resultado ha sido favorable y ha ayudado a una mejor comprensión y manejo de la teoría. En el intento de geometrizar las teorías físicas, la termodinámica no ha sido la excepción. Empezando por Gibbs, Caratheodory y posteriormente Mrugala se dieron los primeros acercamientos geométricos, que hasta hoy siguen siendo temas de discusión. Todo parte de la idea de asociarle al espacio fase de la termodinámica \mathcal{T} , de dimensión 2n + 1, una estructura de contacto. Estas estructuras se componen de una variedad M de dimensión impar y un campo de hiperplanos ξ de dimensión 2n maximalmente no integrable, que se genera a partir del kernel de una 1-formas η definida sobre la variedad M. A esta 1-forma se le denomina forma de contacto (c.f. capítulo ??). Asociado a la forma de contacto, existe un vector característico \mathcal{R} llamado vector de Reeb. Cualquier campo vectorial definido sobre una variedad de contacto M se puede descomponer en una parte vertical (en dirección del campo de Reeb) y otra horizontal (demás direcciones).

A la variedad de contacto, se le puede dotar de una serie de coordenadas locales llamadas coordenadas de contacto o de *Darboux*. En el caso particular del espacio fase de la termodinámica se pueden asociar estas coordenadas a las variables de un sistema. Se asocian n coordenadas a las variables extensivas (q^a) , n coordenadas a las intensivas (p_a) y un potencial termodinámico (Φ) . En este sistema de coordenadas, la 1-forma de contacto tiene una expresión particular que se puede generar de forma canónica (c.f. capítulo ??).

Como en todas las variedades diferenciales, es posible definir subvariedades. Dentro de las muchas subvariedades que podríamos mencionar, existe una de gran relevancia en las variedades de contacto, la subvariedad maximalmente integrable. Para una variedad de contacto M de dimensión 2n + 1, esta subvariedad es de dimensión máxima n y es posible definirla a través de un encaje φ llamado encaje de Legendre. A esta subvariedad también se le conoce como subvariedad de Legendre y queda completamente contenida en el espacio tangente a la variedad. En el caso de la termodinámica esta subvariedad de Legendre \mathcal{E} la denominaremos *Espacio de estados de equilibrio*. Esta subvariedad representa los estados físicos de un sistema termodinámico, y en ella se deben cumplir las leyes de la termodinámica. En particular esta subvariedad queda determinada por la ecuación $\eta = 0$ [3]. Esta condición nos da la 1-forma de Gibbs y de manera natural se escribe la primera ley de la termodinámica, todo esto, sin la necesidad de recurrir a las *diferenciales inexactas*.

El encaje φ , que define a la variedad de estados de equilibrio \mathcal{E} , queda determinado a partir de conocer la relación que guarda el potencial termodinámico con las variables extensivas del sistema, esto es, conocer $\Phi = \Phi(q^a)$. A esta función se le conoce como la ecuación fundamental y nos brinda toda la información del sistema.

Como hemos mencionado anteriormente la variedad \mathcal{E} es de suma relevancia en la descripción de los sistemas termodinámicos, pues esta será su espacio físico. El objetivo central de las diferentes teorías en donde se trata de dar sustento geométrico a la termodinámica, es la de encontrar una métrica \mathcal{G} en \mathcal{E} tal que puede reproducir los resultados clásicos de la termodinámica. Es en este punto, en donde las diferentes teorías difieren. Fisher y Rao propusieron una métrica basada en las propiedades estadísticas del sistema [4]. Posteriormente Weinhold [5] y Ruppeiner [6] introdujeron una métrica Riemanniana, definida a partir del Hessiano de la energía interna y la entropía, respectivamente. Es posible mostrar, que aunque las métricas de Fisher-Rao y de Weinhold y Ruppeiner tienen orígenes muy diferentes, ambas se pueden relacionar con una transformación de Legendre [7]. Ambos tipos de métricas han sido ampliamente utilizadas en el estudio de sistemas termodinámicos.

Una de las propiedades más importantes y características de la termodinámica, es su invariancia bajo transformaciones de Legendre. Al conocer una ecuación fundamental de un sistema termodinámico, se conoce la relación entre el potencial termodinámico y las variables extensivas del sistema. Sin embargo, por diversas cuestiones, tanto técnicas como conceptuales, es posible querer cambiar el potencial termodinámico utilizado. Para lograr este cambio de representación sin perder nada de información, es necesario realizar una transformación de Legendre. Una transformación de Legendre consiste en intercambiar el rol de las variables extensivas con la de las intensivas. Dependiendo de la interpretación y de las necesidades de la teoría, si se quisiera recuperar resultados clásicos de la termodinámica, sería importante que la métrica con la que se dote el espacio de estados de equilibrio fuera invariante bajo este tipo de transformaciones. Cabe recalcar que las métricas previamente mencionadas no son invariantes bajo transformaciones de Legendre. Dada esta característica, los resultados generados por ambas métricas, llevan a propiedades de los sistemas dependientes del potencial termodinámico utilizado, presentando varias inconsistencias. [8, 9].

En años recientes, el formalismo de la geometrotermodinámica (GTD) ha tomado fuerza y relevancia, a medida que ha logrado incorporar la invariancia de Legendre en la geometría de contacto. Una característica importante de este formalismo, es el dotar al espacio fase de la termodinámica \mathcal{T} con una métrica invariante bajo transformaciones de Legendre. Esta métrica se proyecta de manera consistente al espacio de estados de equilibrio por medio del *pullback* del encaje φ , y preserva la invariancia de Legendre impuesta en el espacio fase. En el contexto de este formalismo, se han encontrado dos familias de métricas principalmente, que cumplen con dicha invariancia. Las propiedades físicas que se puedan adquirir a través de estas métricas, no dependerán del potencial termodinámico utilizado [10]. Como resultado, el formalismo de la GTD ha relacionado el escalar de curvatura de la métrica en el espacio de estados de equilibrio con la interacción termodinámica del sistema. Dicho resultado, genera una nueva forma de interpretar las interacciones termodinámicas de los sistemas. De tal forma, un sistema con escalar de curvatura cero, no tendrá interacciones termodinámicas [11]. Un ejemplo clásico es el del gas ideal [10], tratado en repetidas ocasiones en el programa (c.f. Capitúlo 4).

Aún cuando las herramientas adquiridas por el formalismo de la GTD han logrado reproducir la mayoría de los resultados ya conocidos en el ámbito termodinámico, varios problemas del formalismo saltan a la vista. Se ha mencionado (y se hará énfasis a lo largo del trabajo) que las familias de métricas encontradas por la GTD son invariantes bajo transformaciones de Legendre. Sin embargo, esta invariancia es sólo bajo transformaciones discretas. Esto quiere decir, que para un campo vectorial que genere las transformaciones de Legendre, la métrica no permanecerá constante bajo este flujo. Así, podemos decir que las métricas proporcionadas hasta ahora por la GTD no son invariantes bajo transformaciones de Legendre *infinitesimales*.

Aunado a este problema, se puede mencionar también, que se carece de un método matemático canónico para calcular las métricas que puedan ser invariantes bajo dichas transformaciones y sean útiles dentro del formalismo. Este problema, radica en la naturaleza misma de las transformaciones de Legendre, pues éstas no forman un grupo algebraico, sino que son elementos de un grupo mucho más grande llamado grupo de *contactomorfismos* o difeomorfismos de contacto. Este grupo está conformado por todos los difeomorfismos que dejan invariante a la 1-forma de contacto módulo una función real diferente de cero. Un subgrupo importante del grupo de contactomorfismos es el de las transformaciones estrictas de contacto. Este subgrupo lo conforman todas las transformaciones que dejan completamente invariante la 1-forma de contacto. Las transformaciones de Legendre son casos particulares de este subgrupo.

Es posible encontrar un campo vectorial generador de estas transformaciones de contacto y que de forma particular, genere las transformaciones de Legendre. Definimos ciertas funciones diferenciables generadas por la aplicación de la 1-forma de contacto η a un campo vectorial. A estas funciones se les conoce como funciones generadoras de campos Hamiltonianos de contacto. Este concepto, extiende la idea de campos Hamiltonianos estudiados en variedades simplécticas de dimensión par. Usando este concepto, es posible encontrar de forma explícita el campo vectorial que genera las transformaciones discretas de Legendre. A este campo lo denotaremos como el generador infinitesimal de las transformaciones de Legendre.

El objetivo del trabajo es encontrar la familia de métricas más general que contengan como simetría a dichos campos generadores infinitesimales de Legendre. El trabajo se centrará en sistemas con dos grados de libertad, lo que implica, 5 dimensiones en el espacio fase.

Para lograr este objetivo, primero encontraremos de forma explícita los campos generadores de las transformaciones totales de Legendre. Con este campo, resolveremos las ecuaciones de Killing para una métrica general. Las soluciones de las ecuaciones de Killing nos darán la información de lo que debe cumplir cada una de las componentes de la métrica. Usando las técnicas conocidas para las variedades de contacto, construiremos una familia de métricas Riemannianas que cumplan con la invariancia de Legendre. Trataremos de observar si es posible recuperar las métricas actualmente utilizadas en la GTD. Finalmente trataremos de validar estas métricas dentro del mismo formalismo y observar su comportamiento en algún ejemplo previamente estudiado por la GTD.

Sabemos que existen diferentes maneras de dotar a una variedad de una métrica, una muy particular es la propuesta en este trabajo, mediante las ecuaciones de Killing. Sin embargo, es posible poner una métrica partiendo de un tensor 1-1 ϕ conocido como *cuasi-estructura de contacto*. Este tensor se define como el producto tensorial entre la 1-forma de contacto η y el vector de *Reeb* \mathcal{R} (c.f. capítulo 2, sección 2.3). Con este tensor, es posible definir, de forma canónica, una métrica que cumpla que la diferencial de la 1-forma de contacto sea igual a la métrica aplicada a un par de campos vectoriales, donde uno de ellos sea un múltiplo de ϕ . A este tipo de métricas se les conoce como métricas asociadas a una cuasi estructura de contacto. En la parte final de este trabajo se encontrarán las cuasi-estructuras de contacto existentes para sistemas de dos grados de libertad (variedad de 5 dimensiones) y las métricas que generan estas estructuras.

Por último, en este trabajo se intentará encontrar una familia de métricas para sistemas con tres grados de libertad y poder así, dar una primera idea de generalización para sistemas con n grados de libertad.

3

Geometría de contacto

Para describir la termodinámica en términos de conceptos geométricos, es necesario empezar definiendo los conceptos a utilizar. Llamaremos \mathcal{T} a la variedad que representará al espacio fase de la termodinámica. Esta variedad tendrá dimensión 2n + 1. En esta variedad se puede definir un campo de hiperplanos ξ de dimensión 2n que sea maximalmente no integrable. Esta propiedad implica que el campo ξ se puede escribir como ker (η) en donde η es una 1-forma definida de manera global en todo el espacio cotangente de la variedad \mathcal{T} . A la pareja (\mathcal{T}, ξ) se le conoce como una estructura de contacto. Es así, como la geometría de contacto toma relevancia en este trabajo.

En este capítulo se pretende introducir al lector a la geometría de contacto, haciendo un breve repaso de los fundamentos, así como de sus estructuras y propiedades más importantes. Estas estructuras son muy importantes no sólo en el ámbito de la termodinámica, sino también en la teoría de las ecuaciones diferenciales. Su estudio no es demasiado basto, pues hasta ahora la mayoría de los trabajos se enfocan en la geometría de las variedades con dimensión par. Este tipo de variedades son caracterizadas a través de la geometría simpléctica.

Se hará un breve resumen de la teoría de la geometría de contacto que sea relevante para los diferentes casos que estudiaremos a lo largo del trabajo. La información se presentará de una manera formal y general, posteriormente en el trabajo, la mayoría de estos resultados y propiedades serán utilizados en los casos particulares que resulten en la termodinámica.

3.1. Variedades de contacto.

Sea M una variedad diferenciable, con TM su haz tangente, se puede definir un sub haz $\xi \subset TM$, C^{∞} con $CoDim(\xi) = 1$ (i.e. Dim(M) - 1), como un campo de hiperplanos de M.

Lema 1 Sea M una variedad diferenciable de dimensión 2n + 1; $\xi \subset TM$ un campo de hiperplanos de codimensión 1 y η una 1-forma definida globalmente en T^*M . Localmente se puede escribir $\xi = Ker(\eta)$ si, y sólo si ξ es coorientable.

Prueba. Supongamos que ξ es coorientable. Por definición, si ξ es coorientable, entonces TM/ξ es trivial ($\simeq \mathbb{R}^n$). Tomemos una métrica Riemanniana auxiliar g en M. Definimos el haz ξ^{\perp} de dimensión 1, como el complemento ortogonal de $\xi \in TM$ para la métrica g. Entonces podemos escribir $TM \simeq \xi \oplus \xi^{\perp}$, por lo que $TM/\xi \simeq \xi^{\perp}$ es trivial. Sea $p \in M$, existe $U \in M$ vecindad alrededor de p tal que $\xi^{\perp}|_{U_p}$ es trivial. Sea X una sección de $\xi^{\perp}|_{U_p}$ diferente de cero, definimos una 1-forma $\eta_U \in U$ como $\eta_U = g(X, \cdot)$. Por lo tanto $\xi^{\perp}|_{U_p} = Ker(\eta_U)$. Como ξ^{\perp} es trivial, entonces η y X se pueden extender de manera global.

Suponemos que $\xi = Ker(\eta)$ con η 1-forma globalmente definida. Se puede definir una sección global X de ξ^{\perp} que cumpla $g(X, X) \equiv 1 \ge \eta(X) > 0$. Por lo tanto ξ es coorientable.

Definición 1 Sea M una variedad de dimensión 2n + 1. Llamamos estructura de contacto a un campo de hiperplanos maximal no integrable, tal que $\xi = Ker(\eta) \subset TM$.

Que el campo de hiperplanos ξ sea maximal no integrable, implica que η debe cumplir

$$\eta \wedge (d\eta)^n \neq 0, \tag{3.1}$$

en donde $(d\eta)^n = \bigwedge_{i=1}^n d\eta$. A la 1-forma η se le conoce como la forma de contacto. Observamos que la condición $\eta \wedge (d\eta)^n \neq 0$ no depende de la forma de contacto elegida, sino de la propiedad $\xi = Ker(\eta)$. Supongamos que β es una 1-forma que también genera al hiperplano ξ . Como ambas formas $\eta \neq \beta$ generan el mismo plano, β debe ser de la forma $\beta = \lambda \eta \text{ con } \lambda \in C^\infty : M \to \mathbb{R} \setminus \{0\}$, por lo que

$$\beta \wedge (d\beta)^n = (\lambda\eta) \wedge (\lambda d\eta)^n \tag{3.2}$$

$$=\lambda^{n+1}\eta\wedge(d\eta)^n\neq 0.$$
(3.3)

Esto define una clase de equivalencia de 1-formas que generan la misma estructura de contacto $[\eta]$. A la pareja $(M, [\eta])$ se le llama variedad de contacto. Para el caso de 3 dimensiones podemos escribir la condición de no integrabilidad maximal en términos de los corchetes de Lie. Dados dos campos vectoriales X, Y, el corchete de Lie genera un nuevo campo definido como [X,Y], donde $\mathcal{L}_X Y \equiv [X,Y]$. Al tener una función $f \in C^{\infty}$, este nuevo campo opera [X,Y](f) = X(Y(f)) - Y(X(f)).

Proposición 1 Sea (M, η) variedad de contacto de dimensión 3, con ξ campo de hiperplanos tal que $\xi = Ker(\eta)$ y sean $X, Y \in \Gamma(TM)$ linealmente independientes, tales que $X, Y \in \xi \ \forall p \in M$. La condición $\eta \land d\eta \neq 0$ es equivalente a $[X, Y]_p \notin \xi_p$.

Prueba. Como estamos en 3 dimensiones, la forma maximal de volumen se escribe como $\eta \wedge d\eta$, para que esto sea diferente de cero, basta con pedir que $d\eta \neq 0$. Evaluando $d\eta$ en los campos X y Y tenemos

$$d\eta(X,Y) = X(\eta(Y)) + Y(\eta(X)) - \eta([X,Y])$$
(3.4)

$$= -\eta([X,Y]), \qquad (3.5)$$

ya que $X, Y \in \xi$. Si pedimos que $d\eta \neq 0 \Rightarrow \eta([X, Y]) \neq 0$, por lo que $\eta([X, Y]) \notin \xi \square$.

3.1.1. Coordenadas y sub-variedades integrables

Para una variedad de contacto M es posible asociarle coordenadas locales. Existen unas coordenadas locales, en las que la 1-forma de contacto se puede escribir de manera canónica y siempre se pueden utilizar, facilitando la mayoría de los cálculos. Estas coordenadas son conocidas como coordenadas de contacto o de *Darboux*. A lo largo del trabajo se utilizaran dichas coordenadas a menos que se especifique lo contrario.

Teorema 1 [Coordenadas de Darboux]. Sea (M^{2n+1}, η) variedad de contacto, $\forall p \in M$ existe una vecindad tal que existen coordenadas locales (x^k, y^k, ϕ) con k = 1, ..., n, en las cuales $\eta = d\phi - \sum_{k=1}^n y^k dx^k$.

Prueba. Sea $p \in M$, se puede formar una bola de dimensión 2n alrededor de una vecindad de p tal que sea transversal al hiperplano ξ_p . En esta bola $d\eta$ es una forma simpléctica (ya que $\xi = Ker(\eta)$), por lo que existe un sistema de coordenadas (x^k, y^k, ϕ)

tal que

$$d\eta = -\sum_{k=1}^{n} dx^{k} \wedge dy^{k}$$

$$\Rightarrow \quad d(\eta + \sum_{k=1}^{n} y^{k} dx^{k}) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \eta + \sum_{k=1}^{n} y^{k} dx^{k} = df,$$

para alguna función f. Si tomamos $\phi = f$ obtenemos

$$\eta = d\phi - \sum_{k=1}^{n} y^k dx^k \quad \Box \,. \tag{3.6}$$

A partir de estas coordenadas locales es posible también generar de manera canónica el campo de hiperplanos ξ con base en 2n campos vectoriales: $\xi = (\chi_k, P_k)$, en donde

$$P_{k} = \frac{\partial}{\partial y_{k}}, \qquad \chi_{k} = \frac{\partial}{\partial x_{k}} - y_{k} \frac{\partial}{\partial \phi}; \qquad \text{para} \quad k = 1, \dots, n; \qquad (3.7)$$

de tal forma que $\eta(\chi_k) = \eta(P_k) = 0.$

Asociado a la forma de contacto, existe un campo característico \mathcal{R} globalmente definido llamado campo de *Reeb*, definido por

$$i_{\mathcal{R}}d\eta = d\eta(\mathcal{R}, \cdot) = 0, \qquad i_{\mathcal{R}}\eta \equiv \eta(\mathcal{R}) = 1.$$
 (3.8)

El campo de *Reeb* se puede escribir en términos de las coordenadas de contacto como $\mathcal{R} = \frac{\partial}{\partial \phi}$. Entre los campos vectoriales χ_k, P_k que forman el campo de hiperplanos ξ y el campo *Reeb* se cumplen las siguientes reglas de conmutación:

$$[\chi_i, \chi_j] = [P_i, P_j] = [\chi_i, \mathcal{R}] = [P_i, \mathcal{R}] = 0$$
(3.9)

$$[\chi_i, P_j] = \delta_{i,j} \mathcal{R} \,. \tag{3.10}$$

Observamos que la última relación de conmutación nos da exactamente la condición de no integrabilidad maximal [3]. Llamaremos al conjunto de campos vectoriales χ_k , P_k y \mathcal{R} una distribución de contacto. Para una variedad de contacto M^{2n+1} decimos que $M^r \subset M^{2n+1}$ es una subvariedad integrable si $\eta(X) = 0$ para todo campo tangente X. Para las subvariedades integrables existe una restricción en las dimensiones que puede tener. Para eso revisamos el siguiente teorema:

Teorema 2 Sea M^{2n+1} una variedad de contacto con 1-forma de contacto η , entonces existen subvariedades tales que tienen dimensión máxima n.

Supongamos que para la variedad de contacto M^{2n+1} tenemos (x^i, y^i, z) para $i = 1 \dots n$ coordenadas locales de Darboux. En estas coordenadas la $\eta = dz - \sum_{i=1}^{n} y^i dx^i$. Si consideramos las coordenadas x^i, z como constantes, encontramos una subvariedad integrable de dimensión máxima.

A las subvariedades integrales de dimensión máxima n se les conoce como subvariedades de Legendre y se pueden definir a partir de un encaje $\varphi : N^n \to M^{2n+1}$ llamado encaje de Legendre, que cumpla con la condición isotrópica $\varphi^*(\eta) = 0$.

3.2. Transformaciones de contacto

Las transformaciones de contacto son de vital relevancia a lo largo del trabajo, pues las transformaciones de Legendre son casos particulares de estas transformaciones. Trataremos de definir algunas propiedades de las transformaciones en general y establecer los diferentes objetos matemáticos que las describen. El conocimiento de estas transformaciones de contacto, nos es de gran ayuda para conocer la naturaleza de las transformaciones Legendre y así, poder entender mejor las necesidades que deben satisfacer las métricas para cumplir nuestro objetivo.

Definición 2 Sea M una variedad de contacto. Definimos $Diff(M) = \{\lambda : M \to M / \lambda es un difeomorfismo\}$ como el grupo de difeomorfismos de M.

Una vez definido el grupo Diff(M) podemos definir los difeomorfismos que en realidad nos interesan.

Definición 3 Sea $\lambda : M \to M$ difeomorfismo; será difeomorfismo de contacto si preserva la estructura de contacto, i.e.

$$\lambda^* \eta = f\eta, \quad con \quad f \in C^\infty \neq 0.$$
(3.11)

Estos difeomorfismos de contacto también conocidos como *contactomorfismos* generan un subgrupo del grupo de difeomorfismos de M. **Definición 4** Sea M una variedad de contacto $y \xi$ el campo de hiperplanos asociado a M tal que (M, ξ) generan una variedad de contacto, definimos el grupo

$$Con(M,\xi) = \{\lambda \in Diff(M) / \lambda_*(\xi) \subset \xi\}, \qquad (3.12)$$

como el subgrupo de contactomorfismos de M.

Este grupo se puede definir también a partir de la 1-forma de contacto

$$Con(M,\xi) = \{\lambda \in Diff(M) \mid \lambda^*(\eta) = f\eta, f \in C^{\infty} \text{ con } f \neq 0\}.$$
(3.13)

Es importante observar que los difeomorfismos de contacto preservan la estructura de contacto pero no la forma de contacto particular. Esta definición del subgrupo de contacto, tampoco preserva la orientación de ξ . Si queremos mantener la orientación, es necesario pedir que $f(x) > 0 \forall x \in M$.

Es posible escribir este subgrupo como un subgrupo de un parámetro.

Definición 5 Sea Diff(M) el grupo de difeomorfismo sobre M. Definimos $\lambda_t \subset Diff(M)$: $M \to M$ (subgrupo de un parámetro), tal que

$$\lambda_t^* \eta = \rho_t \eta \qquad para \quad f_t \in C^\infty \neq 0 \,\forall \, t \,. \tag{3.14}$$

Sea X un generador del subgrupo de un parámetro $\lambda_t, \forall p \in M \text{ y } h \in C^{\infty}(M)$

$$Xh(p) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \lambda_t^* h(p) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} h(\lambda_t(p)), \qquad (3.15)$$

por lo que X será un campo vectorial asociado a la transformación λ_t , cumpliendo

$$\mathcal{L}_X \eta = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \lambda_t^*(\eta) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} f_t \eta = \tau_t \eta \,, \tag{3.16}$$

en donde $\tau_t \equiv \frac{d}{dt}\rho_t$. si $\tau_t = 0$, decimos que η es invariante bajo λ_t . Llamamos X campo vectorial de contacto generado pro la función f_t . Observamos que X genera un álgebra de Lie:

$$\operatorname{con}(M,\xi) = \{ X \in \mathfrak{X}(M) / \operatorname{si} Y \in \Gamma(\xi) \Rightarrow [X,Y] \in \Gamma(\xi) \},$$
(3.17)

para $\mathfrak{X}(M)$ el espacio vectorial de todos los campos vectoriales C^{∞} sobre M y $\Gamma(\xi)$ el espacio de las secciones C^{∞} de ξ [12].

Podemos observar que (3.17) es equivalente a pedir que

$$\mathcal{L}_X \eta = a_X \eta, \quad \text{con } a_X \in C^\infty(M), \tag{3.18}$$

en donde $a_X = \mathcal{R}f$, de tal forma que X es generado por la función f.

Podemos ser un poco más restrictivos en las transformaciones de contacto, y pedir que no sólo se preserve la estructura de contacto ξ , sino que también se preserve la 1-forma de contacto particular.

Definición 6 Sea $\lambda : M \to M$ un difeomorfismo de contacto, λ será llamada difeomorfismo estricto de contacto si

$$\lambda^* \eta = \eta \,. \tag{3.19}$$

Los difeomorfismos estrictos de contacto también generan un subgrupo del grupo de contactomorfismo $Con(M,\xi)$.

Definición 7 Sea $Con(M,\xi)$ el grupo de contactomorfismos, definimos el subgrupo de contactomorfismos estrictos o difeomorfismos estrictos de contacto

$$CON(M,\eta) = \{\lambda \in Con(M,\xi) / \lambda^* \eta = \eta\}.$$
(3.20)

Este grupo también genera un álgebra de Lie

$$\mathfrak{CON}(M,\eta) = \{ X \in \mathfrak{con}(M,\xi) / \mathcal{L}_X \eta = 0 \}.$$
(3.21)

Bajo toda esta estructura, η puede jugar el papel de una conexión en M, haciendo que $\xi = (\chi_k, P_k)$ sea una distribución horizontal sobre la variedad y \mathcal{R} sea una distribución vertical. Estos 2n + 1 campos vectoriales los podemos tomar como una base para cualquier otro campo sobre la variedad. Debido a que cualquier campo vectorial \vec{X} se puede escribir como la suma de una parte vertical y otra horizontal $\vec{X} = X_v + X_h$, podemos escribir

$$x_v := \eta(\vec{X})\mathcal{R}; \qquad X_h := \vec{X} - X_v. \tag{3.22}$$

Tomando en cuenta este concepto de descomposición de campos vectoriales, podemos introducir el concepto de derivada covariante sobre M.

3.3. Variedades de contacto con métrica

Dentro de la geometría simpléctica, varias estructuras con métricas Riemannianas han sido estudiadas a través de la historia [13], tales como la cuasi-estructura compleja, la cuasi-estructura Hermitiana y las estructuras de Kähler y cuasi-Kähler. De la misma forma, la geometría de contacto cuenta con un número de estructuras dotadas de métricas Riemannianas. En este capítulo, nos enfocaremos en este tipo de estructuras y algunas de sus propiedades.

Para una variedad M^{2n+1} existen diferentes maneras de definir las estructuras de contacto. En este trabajo se hará a partir de ciertos tensores y sus propiedades.

Definición 8 Se le llama a la variedad de contacto $(M^{2n+1}, \mathcal{R}, \eta)$ una cuasi-estructura de contacto, si admite un tensor ϕ de tipo (1, 1) tal que cumpla

$$\phi^2 = -\mathbb{I} + \eta \otimes \mathcal{R} \,, \tag{3.23}$$

para \mathcal{R} el vector de Reeb asociado a η la 1-forma de contacto.

Es posible agregar las propiedades $\phi(\mathcal{R}) = 0$ y $\eta \circ \phi = 0$ a la definición. Sin embargo, es posible demostrar estas propiedades al suponer que (3.23) se cumple [18]. Es común encontrar que a la variedad M^{2n+1} con cuasi-estructura de contacto se le denomine variedad con estructura- $(\phi, \mathcal{R}, \eta)$.

Definición 9 Se dice que la variedad M^{2n+1} tiene una cuasi-estructura métrica de contacto si admite un tensor métrico g tal que

$$g(\phi X, \phi Y) = g(X, Y) - \eta(X)\eta(Y). \qquad (3.24)$$

A dicha métrica g se le denomina métrica compatible.

Es fácil observar que si tomamos $Y = \mathcal{R}$ tenemos

$$\eta(X) = g(X, \mathcal{R}). \tag{3.25}$$

De manera sencilla se puede generar una métrica compatible para una variedad de contacto. Sea G una métrica cualquiera, definimos

$$\tilde{G}(X,Y) = G(\phi^2 X, \phi^2 Y) + \eta(X)\eta(Y), \quad y \quad \eta(X) = G(X,\mathcal{R}), \quad (3.26)$$

ahora simplemente definimos la métrica g como

$$g(X,Y) = \frac{1}{2} \left(\tilde{G}(X,Y) + \tilde{G}(\phi X,\phi Y) + \eta(X)\eta(Y) \right) .$$
 (3.27)

17

Es fácil observar que g es una métrica compatible. Para una variedad M^{2n+1} con una cuasi-estructura métrica de contacto, podemos construir una base local ortonormal que es bastante útil conocida como *base-* ϕ . Esta base, para una vecindad coordenada \mathcal{U} se escribe como $\{X_i, \tilde{X}_i, \mathcal{R}\}$ con i = 1...n, en donde X_i son campos vectoriales unitarios, ortogonales a \mathcal{R} y $\tilde{X}_i = \phi X_i$. Para esta nueva base, el tensor ϕ tiene una representación en matrices

$$\phi = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbb{I} & 0 \\ \mathbb{I} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$
 (3.28)

A partir de la definición de métrica compatible, se puede definir una 2-forma Φ que llamaremos *forma fundamental* de la cuasi-estructura métrica de contacto, dada por la ecuación

$$\Phi(X,Y) = g(X,\phi Y). \tag{3.29}$$

Definición 10 Sea M^{2n+1} una variedad de contacto. Decimos que la variedad tiene una estructura métrica de contacto o estructura Riemanniana de contacto si admite una métrica g tal que la 2-forma fundamental Φ sea d η . Esto significa que

$$g(X,\phi Y) = d\eta(X,Y). \tag{3.30}$$

A dicha métrica g se le llama métrica asociada.

4

Geometrotermodinámica

4.1. La termodinámica

En la vida cotidiana, nos enfrentamos a problemas comunes en donde se involucran sistemas macroscópicos. Podemos intentar medir la longitud de algún objeto que tenemos en casa o podemos medir la temperatura del agua para bañar a un bebé. Contrario a la percepción que se tienen, existe una rama de la física que es capaz de modelar dichos sistemas a través de variables que se pueden medir incluso en nuestras casas. Esa rama es la termodinámica.

La termodinámica no propone nuevas leyes de la física como la conocemos, únicamente se basa en algunos teoremas empíricos y utiliza las leyes ya existentes llevándolas a un nivel en donde relaciona propiedades de los sistemas que no son evidentes. A la termodinámica le interesan los sistemas que "no cambian mucho" o cambian "muy lento" en el tiempo. Esto quiere decir que el tiempo que tarda en cambiar es bastante grande comparado con los cambios en los observables a escala atómica. Si tomamos un objeto, del cual queremos medir su longitud, la medida no tendrá cambios significativos en unas horas, minutos o segundos, tiempos demasiado grandes comparados con los sistemas de escala atómica que varían con el tiempo en órdenes típicos de $10^{-15} s$. Incluso observables que cambian en un tiempo del orden de $10^{-7} s$ son increíblemente lentos comparados con las escalas mencionadas anteriormente [14].

Podemos decir que la termodinámica describe, a causa de su naturaleza macroscópica, únicamente estados "estáticos" de los sistemas [14]. Este hecho, require de una cierta independencia de las variables en el tiempo. Para describir este tipo de sistemas, las variables sujetas a leyes de conservación son las más comunes para ser utilizadas como coordenadas independientes del tiempo. Debido a esto, la cantidad de variables en estos sistemas es mucho menor a la de los sistemas de escala atómica. Si además sumamos el hecho de que las nociones espaciales de un sistema macroscópico son bastante más grandes o burdas comparadas con las escalas atómicas, la restricción para obtener variables pertinentes se hace más grande.

Las variables que cumplen las características previamente mencionadas se dividen en dos tipos: extensivas e intensivas. Las variables extensivas son aquellas que dependen de las dimensiones del sistema, de este tipo tenemos el volumen, la entropía y el número de partículas, por mencionar algunas. Las variables intensivas son aquellas que no dependen de las dimensiones del sistema. Dichas variables permanecen constantes cuando el sistema es modificado en su "tamaño". Ejemplo de este tipo de variables son la temperatura, la presión y el potencial químico entre otras.

Conociendo esta información, es posible escribir las variables termodinámicas intensivas (usualmente la temperatura) en función de las otras variables extensivas del sistema. A estas funciones se les conoce como ecuaciones de estado. Para obtener toda la información de un sistema, no basta con conocer una función de estado, es necesario conocerlas todas. Se puede mostrar que conocer todas las ecuaciones de estado de un sistema es equivalente a conocer la ecuación fundamental del sistema [14].

Con las leyes generales de la física, es posible describir las respuestas de los sistemas termodinámicos a los cambios de su entorno. Estas leyes son conocidas como leyes de la termodinámica. En general podemos hablar de cuatro leyes de la termodinámica empezando por la ley cero hasta la primer, segunda y tercera ley. Para este trabajo, la ley más relevante será la primera.

La primera ley de la termodinámica para procesos reversibles se puede establecer partiendo de la conservación de la energía [1]. Para un sistema que puede intercambiar trabajo, energía y calor con sus alrededores se cumple que

$$dU = \delta W + \delta Q \,, \tag{4.1}$$

en donde δW y δQ representan diferenciales no exactas del trabajo y calor respectivamente. Esto se debe a que el cambio en estas variables depende de la forma en que se lleve a cabo dicho cambio. Del otro lado, la diferencial de la energía interna sí es exacta, pues no depende de la forma del cambio. Podemos reescribir de manera más explícita (4.1), a partir de las relaciones que guardan los conceptos de calor y trabajo termodinámico:

$$dU = TdS - PdV + \mu dN + \dots, \qquad (4.2)$$

donde hemos supuesto un número indeterminado de variables macroscópicas y un sólo elemento químico.

Hasta ahora, no se ha hablado de ningún fundamento matemático elemental que sostenga dichas leyes y relaciones de sistemas, pues todo esta información se basa en propiedades empíricas. La geometría nos ofrece un camino para poder darle dicho fundamento matemático a las leyes de la termodinámica de una manera más abstracta y fundamental. La mayor parte de estos y otros resultados pueden ser recreados de forma más sencilla a partir del uso de la geometría como herramienta. El formalismo de la Geometrotermodinámica, que a continuación presentaremos, es el que ha tenido mayor impulso y resultados en los últimos años.

4.2. Fundamentos de la Geometrotermodinámica

A principios del siglo XX, Einstein intentó describir el campo gravitacional a partir de conceptos geométricos. Esto lo llevó a proponer la idea de asociar un campo de fuerzas con la curvatura de una variedad [10]. A partir de ese momento, se ha intentado asociar conceptos geométricos para cada una de las teorías físicas relevantes.

A mediados de dicho siglo, Yang y Mills le asignaron un concepto geométrico al campo electromagnético, al usar el haz fibrado principal de la variedad de espacio-tiempo de Minkowski, bajo la simetría del grupo U(1). Posteriormente, se le pudo asociar a las interacciones electrodébil y fuerte la curvatura del haz principal de la variedad de Minkowski, fibrada por los grupos SU(2) y SU(3) respectivamente [15, 10]. Bajo esta idea, la termodinámica no se ha quedado atrás, y desde Caratheodory, pasando por Mrugala, Fisher y Rao, Weinhold y Ruppeiner, y finalmente la Geometrotermodinámica (GTD), se ha tratado de asociar conceptos geométricos a esta teoría. En esta sección revisaremos los conceptos planteados por esta última teoría (la GTD) y discutiremos algunos elementos acerca de los diferentes problemas encontrados a lo largo de su desarrollo.

Consideremos \mathcal{T} , el espacio fase de la termodinámica, una variedad de dimensión 2n + 1. Consideraremos que esta variedad se puede caracterizar como una variedad de contacto. A esta variedad le podemos dar coordenadas de Darboux $Z^A = \{q^a, p_a, \Phi\}$ para $A = 1 \dots 2n + 1$ y $a = 1 \dots n$. Estas coordenadas están asociadas a las variables del sistema

termodinámico. Las coordenadas q^a representan las variables extensivas del sistema, las coordenadas p_a las intensivas y finalmente Φ representa el potencial termodinámico utilizado. En estas coordenadas podemos asociarle a la variedad \mathcal{T} una 1-forma de contacto η escrita de forma canónica (3.6)

$$\eta = d\Phi - \sum_{i=1}^{n} p_i dq^i \,. \tag{4.3}$$

Dada la herramienta de la geometría de contacto, podemos empezar a ver las características y propiedades de esta variedad.

Como hemos mencionado antes, uno de las principales características de la termodinámica es la invariancia bajo transformaciones de Legendre. Observemos que la 1-forma de contacto también lo es. Tomemos una transformación de Legendre de las coordenadas dada por

$$\{Z^A\} \to \{\tilde{Z}^A\} = \{\tilde{\Phi}, \tilde{q}^a, \tilde{p}_a\}, \qquad (4.4)$$

en donde

$$\Phi = \tilde{\Phi} - \delta_{kl} \tilde{q}^k \tilde{p}^l, \quad q^i = -\tilde{p}_i, \quad q^j = \tilde{q}^j, \quad p_i = \tilde{q}^i, \quad p_i = \tilde{p}_i, \quad (4.5)$$

para i, j subconjuntos de los índice $\{1, \ldots, n\}$ de tal forma que $i \neq j$ y $k, l = 1, \ldots, i$. Podemos observar que si $i = \{1, \ldots, n\}$ tenemos una transformación total de Legendre (i.e. hemos cambiado absolutamente todas las coordenadas). De la misma forma, si $i = \emptyset$, la transformación es la identidad. Observamos que una transformación de Legendre cambia la forma de contacto de la siguiente manera:

$$\eta \to \tilde{\eta} = d\tilde{\Phi} - \sum_{i=1}^{n} \tilde{p}_i d\tilde{q}^i \,. \tag{4.6}$$

Por lo que la 1-forma de contacto es invariante bajo transformaciones de Legendre.

Podemos asociarle a esta variedad una métrica Riemanniana G. Pediremos que la métrica G con la que dotemos a \mathcal{T} sea invariante de Legendre. Obtenemos así, una variedad de contacto Riemanniana (\mathcal{T}, η, G) completamente invariante bajo transformaciones de Legendre. Este será el elemento básico del cual partirá todo el formalismo de la GTD.

Consideremos la subvariedade de Legendre del espacio fase de la termodinámica \mathcal{E} , esto es la máxima subvariedad integrable encajada en \mathcal{T} , definida a partir del encaje $\varphi : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$.

Por ser subvariedad de Legendre, dim $(\mathcal{E}) = n$ en donde *n* representa los grados de libertad de un sistema termodinámico (i.e. el número de variables termodinámicas independientes necesarias para describir el sistema). Esta subvariedad será la variedad física del sistema y le llamaremos espacio de estados de equilibrio. En ella se deberían cumplir las leyes de la termodinámica y la invariancia bajo transformaciones de Legendre. Para describir a \mathcal{E} podemos asociarle las variables extensivas q^a como coordenadas, por lo que

$$\varphi: \{q^a\} \to \{Z^A(q^a)\} = \{\Phi(q^a), p_a(q^a), q^a\}.$$
(4.7)

El encaje φ es conocido como el encaje de Legendre y cumple con la propiedad isotrópica

$$\varphi^*(\eta) = \varphi^*\left(\eta = d\Phi - \sum_{i=1}^n p_i dq^i\right) = \left(\frac{\partial\Phi}{\partial q^a} - p_a\right) dq^a = 0.$$
(4.8)

Esta última condición implica diferentes cosas. Podemos observar que

$$\Phi = \Phi(q^a), \qquad p_a = \frac{\partial \Phi}{\partial q^a}, \qquad d\Phi = p_a dq^a.$$
(4.9)

Llamamos a la relación $\Phi(q^a)$ la ecuación fundamental del sistema, que proporciona toda la información necesaria del sistema y por tanto, define también el encaje φ . La segunda ecuación de (4.9) es usualmente conocida como la condición de equilibrio termodinámico. Finalmente, la tercera ecuación de (4.9) corresponde de manera natural a la primera ley de la termodinámica.

Si suponemos que al espacio fase de la termodinámica se le ha equipado con una métrica *G* invariante bajo transformaciones de Legendre, podemos proyectar esta métrica al espacio de estados de equilibrio. La proyección estará dada por el pullback del encaje φ . La métrica será

$$g = \varphi^*(G), \qquad (4.10)$$

la cual, resulta ser también invariante bajo transformaciones de Legendre (propiedad heredada del espacio fase). Aquí radica la importancia de la invariancia de Legendre de la métrica G. Esta propiedad es la única libertad que nos queda para construir el espacio fase de algún sistema en particular. Las demás propiedades quedan fijas a partir del sistema que se quiere describir. Pedir que la métrica sea invariante bajo transformaciones de Legendre, implica una cierta restricción en las componentes de la métrica G_{AB} . Sin embargo, es posible demostrar que la solución no es trivial ni única [16]. Esto genera una familia de soluciones, por lo que tendremos una familia de métricas con estas características. Podemos observar que la métrica plana $G = dZ^A dZ_B$ (convención de suma de Einstein) no es invariante bajo transformaciones de Legendre dada la transformación (4.5). Esto implica que el espacio fase tendrá curvatura.

Durante el desarrollo del formalismo de la GTD se han encontrado, de manera empírica, dos familias de métricas para el espacio fase:

$$G_T = \eta \otimes \eta + \Omega(\xi^a{}_b q^b p_a)(\chi^c{}_d dq^d \otimes dp_c)$$
(4.11)

y también

$$G_P = \eta \otimes \eta + \Omega \sum_{i=1}^n \left[(q^i p_i)^{2k+1} dq^i \otimes dp_i \right], \qquad (4.12)$$

en donde Ω es una función de las coordenadas de Darboux invariante bajo transformaciones de Legendre, $\xi^a_{\ b}$ y $\chi^c_{\ d}$ son matrices $n \times n$ diagonales que generan la estructura algebraica de cada familia de métricas y k es un número entero. La métrica (4.11) es invariante bajo transformaciones totales discretas de Legendre, mientras que (4.12) es invariante baja transformaciones parciales.

Estas métricas han sido utilizadas en diversos sistemas termodinámicos ya conocidos, permitiendo interpretar el escalar de curvatura del espacio de estados de equilibrio como una medida de la interacción termodinámica del sistema. Si el escalar de curvatura resulta ser cero, entonces el sistema no tendrá interacción termodinámica. Como ejemplo, trataremos por medio del formalismo de la GTD uno de los sistemas más básicos pero a la vez, más importantes de la termodinámica: El gas ideal.

Ejemplo 1 (Gas ideal) Uno de los sistemas más sencillos e importantes de la termodinámica es el gas ideal. Supongamos que tenemos un gas ideal monoatómico. Consideremos el ejemplo para dos grados de libertad, por lo que n = 2. De esta manera el espacio fase tendrá 5 dimensiones. Consideremos las coordenadas de Darboux del espacio fase

$$Z^{A} = \left\{ S, U, V, \frac{1}{T}, \frac{P}{T} \right\} . \tag{4.13}$$

Esta elección de coordenadas nos lleva a una métrica G_P de la forma

$$G_P = \left(dS - \frac{1}{T}dU - \frac{P}{T}dV\right)^2 + \Omega\left[\left(\frac{U}{T}\right)^{2k+1}dUd\left(\frac{1}{T}\right) + \left(\frac{VP}{T}\right)^{2k+1}dVd\left(\frac{P}{T}\right)\right].$$
(4.14)

Consideremos la ecuación fundamental del sistema dada por la representación de la en-

tropía como

$$S(U,V) = \frac{3K}{2}\ln U + K\ln V.$$
(4.15)

De esta forma el encaje φ queda completamente determinado por lo que podemos encontrar la métrica inducida en el espacio de estados de equilibrio \mathcal{E} dada por (4.10)

$$g = -K^{2k+2}\Omega\left[\left(\frac{3}{2}\right)^{2k+2}\frac{dU^2}{U^2} + \frac{dV^2}{V^2}\right].$$
(4.16)

Sabemos que la función Ω es arbitraria, de la misma forma que el entero k. Podemos suponer a modo de simplificación que $\Omega = 1$ y k = -1. La métrica queda entonces

$$g = \frac{dU^2}{U^2} + \frac{dV^2}{V^2} \,. \tag{4.17}$$

A partir de un cálculo directo, podemos observar que el escalar de curvatura es nulo (R = 0) y por tanto, esto coincide con la idea de que el escalar de curvatura mide una cierta interacción termodinámica.

A pesar de que hemos hecho énfasis en que el formalismo de la GTD nos permite introducir una invariancia de Legendre en la métrica del espacio fase de la termodinámica y obtener, por medio del encaje de Legendre, una métrica igualmente invariante bajo transformaciones de Legendre, existen algunos inconvenientes no menores. El primero de ellos, es que ambas familias de métricas han sido encontradas de manera empírica. Al exigir que la métrica sea invariante discreta de Legendre, aparece un sistema de ecuaciones algebraicas [16]. Al resolver el sistema particular, se encuentra una solución con un número extenso de constantes arbitrarias que en un principio, no se sabe el criterio para poder fijarlas. Todo le problema radica en que las transformaciones de Legendre no generan un grupo, sino que son parte de grupos mucho más grandes.

Sabemos que la termodinámica cumple, de manera natural, una invariancia discreta de Legendre. Sería interesante, que también se cumpliera la invariancia de Legendre de forma infinitesimal. Esto nos llevaría a investigar el significado físico de dicha simetría. Si esto fuera así, el formalismo de la GTD debería de incorporar esta simetría infinitesimal en la estructura del espacio fase. Desafortunadamente, hasta ahora, no se tiene evidencia de algún sistema ordinario que cumpla con la simetría infinitesimal de Legendre.

Con esta idea, intentaremos observar el comportamiento de la métrica en el espacio fase de la termodinámica al exigirle que cumpla con la simetría infinitesimal de Legendre. En el siguiente capítulo encontraremos el campo vectorial que genera dichas transformaciones de forma explícita y mostraremos que las métricas de la GTD no cumplen con las ecuaciones de Killing para este campo. Se resolverán las ecuaciones de Killing para una métrica general y encontraremos la familia de métricas que cumplen con esta simetría. Se analizarán los resultados y finalmente se tratarán de validar en el contexto de la GTD.

 $\mathbf{5}$

Problema central

El objetivo central de este trabajo es encontrar una familia de métricas, lo más general posible, que cumplan con simetría infinitesimal de Legendre. Esto significa, que al tener un campo vectorial generador de las transformaciones de Legendre, la métrica sea invariante bajo éste flujo.

Para lograrlo, nos enfocaremos es un método principal y nos centraremos en sistemas con dos grados de libertad (n = 2). El método principal consistirá en resolver las ecuaciones de Killing para una métrica general. Mostraremos que las métricas utilizadas en la GTD, son invariantes bajo transformaciones discretas, pero no bajo el flujo del campo vectorial que las genera.

Se analizarán las transformaciones de Legendre desde un punto de vista geométrico y a través del formalismo de las funciones generadoras de campos Hamiltonianos de contacto se encontrará el campo vectorial que genere ciertas transformaciones de contacto, en particular, las transformaciones totales de Legendre.

Con el campo vectorial escrito en las coordenadas de Darboux resolveremos el sistema. Encontraremos una serie de condiciones sobre las componentes de la métrica a partir de la solución de las ecuaciones de Killing. En la geometría de contacto, es muy usual construir métricas por bloque, por lo que nos basaremos en los resultados previos de la GTD para construir los bloques adecuados que formarán nuestra familia de métricas. Finalmente se analizarán las soluciones y se tratará el sistema del gas ideal utilizando nuestros resultado. Con esto, intentaremos validar las métricas resultantes en el contexto de la GTD.

5.1. Transformaciones de Legendre y Hamiltonianos de contacto

Un sistema termodinámico se puede describir a partir de la ecuación fundamental del sistema $\Phi(q^a)$. En esta ecuación se encuentra toda la información necesaria del sistema. A la variable Φ se le conoce como potencial termodinámico. Dentro de la teoría, existen varios potenciales termodinámicos tales como la entropía, la energía libre, la entalpía, entre otros. Dada una ecuación fundamental, es posible cambiar de un potencial termodinámico a otro sin que se pierda información. La forma de lograr esto, es a partir de una transformación de Legendre. A este proceso se le conoce como un cambio de representación.

Los cambio de representación dados por transformaciones de Legendre son de suma importancia, pues permiten cambiar las variables relevantes del sistema. Esto es útil, ya que existen algunas variables termodinámicas que su medición directa se vuelve muy complicada. Tomemos como ejemplo un experimento en donde se ocupa un sistema de dos grados de libertad en la representación de la energía interna molar. En este caso las variables relevantes del sistema son la entropía molar y el volumen. Podemos hacer un cambio en las variables por medio de una transformación de Legendre y encontrar las variables "conjugadas". En este caso serán la temperatura y la presión, respectivamente. Estas nuevas variables son mucho más sencillas de controlar en un laboratorio y la conclusión física a la que podamos llegar con el experimento, no se verá afectada por la transformación de variables realizada.

Podemos decir, con base en estas ideas, que la representación de la termodinámica es invariante bajo transformaciones discretas de Legendre, pues no importa el potencial termodinámico usado. El formalismo de la GTD ha tenido éxito al incorporar esta simetría en la métrica del espacio fase y a su vez, en la métrica inducida por el encaje de Legendre, en le espacio de estados de equilibrio. La exigencia de la invariancia discreta de Legendre genera un sistema de ecuaciones algebraico con muchas constantes arbitrarias que no se sabe como fijar de manera canónica. A pesar de ello, el formalismo de la GTD ha encontrado un par de familias, al resolver de forma directa el sistema de ecuaciones, que han resultado útiles para describir los sistemas ya conocidos.

Aun cuando la termodinámica y, por tanto la GTD, son invariantes bajo transformaciones discretas de Legendre, este trabajo busca incorporar la simetría infinitesimal de dichas transformaciones en le espacio fase de la termodinámica y explorar las posibilidades que esto abre en el espacio de estados de equilibrio para sistemas termodinámicos con dos grados de libertad. Las transformaciones de Legendre son casos particulares de los difeomorfismos de contacto, también llamados contactomorfismos. Estos difeomorfismos son simetrías de la estructura de contacto del espacio fase de la termodinámica \mathcal{T} . Debido a que el haz tangente de la subvariedad de Legendre \mathcal{E} se encuentra completamente contenida en la estructura de contacto, los contactomorfismos preservan el espacio de estados de equilibrio. Esto hace que dichas simetrías sean compatibles con la primera ley de la termodinámica.

Para generar una métrica que sea invariante bajo el flujo de los vectores generadores de las transformaciones de Legendre, es necesario poder escribir dicho campo vectorial en las coordenadas de contacto. Para eso, estudiaremos los contactomorfismos y los campos vectoriales que generan las transformaciones de contacto a través de las funciones generadoras de campos Hamiltonianos de contacto.

Consideremos una aplicación $\chi : \mathcal{T} \to \mathcal{T}$ que deje invariante la estructura de contacto, esto es, un contactomorfismo dado por

$$\chi^* \eta = h \eta \quad \text{para} \quad h : \mathcal{T} \to \mathbb{R}^+,$$

$$(5.1)$$

donde h estrictamente positiva significa que hemos considerado únicamente difeomorfismos que preservan la orientación de la estructura.

Definición 11 Sea $h: M^{2n+1} \to \mathbb{R}$. Definimos un campo vectorial de contacto asociado a esta función X_h como:

$$i_{X_h}\eta \equiv \eta[X_h] = h$$
, $i_{X_h}d\eta = -Dh$,

donde $Dh = dh - (\mathcal{R}h)\eta$.

Para una función $h = h(q^a, p_a, \Phi)$ en coordenadas de contacto, el campo X_h se puede escribir como

$$X_{h} = \frac{\partial h}{\partial p_{i}} \frac{\partial}{\partial q^{i}} + \left(p_{i} \frac{\partial h}{\partial \Phi} - \frac{\partial f}{\partial q^{i}} \right) \frac{\partial}{\partial p_{i}} + \left(h - p_{i} \frac{\partial f}{\partial p_{i}} \right) \frac{\partial}{\partial \Phi} \,. \tag{5.2}$$

De manera general, sabemos que cualquier campo vectorial X sobre la variedad M^{2n+1}

se puede escribir en coordenadas de contacto, como [17]:

$$X = q^{i}(t)\frac{\partial}{\partial q^{i}} + p_{i}(t)\frac{\partial}{\partial p_{i}} + \Phi(t)\frac{\partial}{\partial \Phi}.$$
(5.3)

Si queremos encontrar el flujo, para el cual, este campo vectorial es tangente, se debe cumplir que

$$q^{i}(t) = \dot{q}^{i}, \quad p_{i}(t) = \dot{p}_{i}, \quad \Phi(t) = \dot{\Phi},$$
(5.4)

por lo que el campo quedará escrito como

$$X = \dot{q}^{i}\frac{\partial}{\partial q^{i}} + \dot{p}_{i}\frac{\partial}{\partial p_{i}} + \dot{\Phi}\frac{\partial}{\partial \Phi}.$$
(5.5)

Igualamos las componentes de las ecuaciones (5.2) y (5.5) y encontramos que X_h genera un flujo sobre la variedad dado por

$$\dot{q}^{i} = \frac{\partial h}{\partial p_{i}}, \quad \dot{p}_{i} = p_{i}\frac{\partial h}{\partial \Phi} - \frac{\partial h}{\partial q^{i}}, \quad \dot{\Phi} = h - p_{i}\frac{\partial h}{\partial p_{i}}.$$
 (5.6)

Estas ecuaciones de flujo generalizan las ecuaciones de Hamilton para variedades de contacto. En este sentido, h será una función generadora de un campo Hamiltoniano en toda la extensión de la palabra, si propagamos este flujo en el de Reeb, $\mathcal{L}_{X_h}\eta = 0$, y proyectamos en $Z^{2n} \subset M^{2n+1}$. Observamos a partir de la identidad de Cartan:

$$\mathcal{L}_{X_h} = i_{X_h} d + d \, i_{X_h} \, ,$$

imponemos la propagación por el flujo de Reeb

$$\Rightarrow \mathcal{L}_{X_h} \eta = i_{X_h} d\eta + d (i_{X_h} \eta) = 0$$

$$\Rightarrow i_{X_h} d\eta = -dh = -\left(\frac{\partial h}{\partial \Phi} d\Phi + \frac{\partial h}{\partial q^i} dq^i + \frac{\partial h}{\partial p_i} dp_i\right), \qquad (5.7)$$

resolviendo por evaluación directa:

$$X_{h} = \left(h - p_{i}\frac{\partial h}{\partial p_{i}}\right)\frac{\partial}{\partial \Phi} - \frac{\partial h}{\partial p_{i}}\frac{\partial}{\partial q^{i}} + \frac{\partial h}{\partial q^{i}}\frac{\partial}{\partial p_{i}}.$$
(5.8)

Tomamos la proyección canónica $\Pi: M^{2n+1} \to Z^{2n}$, entonces

$$\Pi_* X_h = \frac{\partial h}{\partial q^i} \frac{\partial}{\partial p_i} - \frac{\partial h}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q^i} = \{h, \cdot\}, \qquad (5.9)$$

que es conocido como el corchete de Poisson que describe a los campos Hamiltonianos sobre

variedades simplécticas.

Podemos tomar como ejemplo el campo vectorial de *Reeb*. Tomemos la función hamiltoniana $h_R = 1$; el campo vectorial asociada a esta función será $X_{h_R} \equiv R = \frac{\partial}{\partial \Phi}$.

Consideremos ahora, la función hamiltoniana de contacto

$$h_i = \frac{1}{2}(q^{i^2} + p_i^2).$$
(5.10)

El campo vectorial generado por esta función hamiltoniana de contacto es

$$X_{L_i} = \frac{1}{2} \left(q^{i^2} - p_i^2 \right) \frac{\partial}{\partial \Phi} + q^i \frac{\partial}{\partial p_i} - p_i \frac{\partial}{\partial q^i} \quad \text{(no hay suma sobre } i\text{)}. \tag{5.11}$$

Para encontrar la transformación de contacto asociada a este campo vectorial, es necesario integrar el flujo dado por

$$\frac{d}{dt}Z_i^A = X_{L_i}^a,\tag{5.12}$$

donde $Z^{\cal A}$ representa las coordenadas de Darboux. Explícitamente, las ecuaciones del flujo estarán dadas por

$$\frac{d}{dt}\Phi = \frac{1}{2}\left(q^{i^2} + p_i^2\right)\,,\tag{5.13}$$

$$\frac{d}{dt}q^i = -p_i\,,\tag{5.14}$$

$$\frac{d}{dt}p_i = q^i \,. \tag{5.15}$$

Estas ecuaciones son equivalentes a las ecuaciones de Hamilton para variedades de contacto. Las ecuaciones (5.14) y (5.15) se pueden integrar directamente. Obtenemos

$$p_{(i)}(t) = p_{(i)}\cos(t) + q^{(i)}\sin(t),$$
(5.16)
(5.16)

$$q^{(i)}(t) = -p_{(i)}\sin(t) + q^{(i)}\cos(t), \qquad (5.17)$$

estas ecuaciones las sustituimos en (5.13) y obtenemos

$$\Phi_{(i)}(t) = \frac{1}{2} \left[q^{i^2} - p_i^2 \right] \sin(t) \cos(t) - p_{(i)} q^{(i)} \sin^2(t) + \Phi \quad \text{(no hay suma sobre } i\text{)}.$$
(5.18)

Observamos que $\Phi(t)$ no es constante a lo largo del flujo de X_{L_i} figura(5.1). Para la

condición inicial en donde $\Phi(0) = \Phi$ constante, existen únicamente cuatro puntos a lo largo de la órbita de X_{L_i} en donde el valor permanece constante. Estos puntos corresponden a rotaciones por un ángulo de $n\pi/2$ en el plano $q^i - p_i$. Si rotamos un ángulo de $\pi/2$, encontramos que se intercambian las i-ésimas coordenadas. Esto da como resultado, una transformación parcial de Legendre de dichas coordenadas

$$\tilde{\Phi}_{(i)} \equiv \Phi_{(i)} \left(\frac{\pi}{2}\right) = \Phi - p_i q^i \quad \text{(no hay suma sobre } i\text{)},\tag{5.19}$$

$$\tilde{p}_i \equiv p_i \left(\frac{\pi}{2}\right) = q^i, \tag{5.20}$$

$$\tilde{q}^i \equiv q^i \left(\frac{\pi}{2}\right) = -p_i. \tag{5.21}$$

Una transformación total de Legendre, es el intercambio de todas las coordenadas del sistema al mismo tiempo, esto es, todas las transformaciones parciales de Legendre simultáneas. Esta transformación es generada por la función hamiltoniana de contacto

$$h = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} \left(q^{i^2} + p_i^2 \right) \,, \tag{5.22}$$

la cual, genera el campo vectorial asociado

$$X_L = \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{2} \left(q^{i^2} - p_i^2\right)\right] \frac{\partial}{\partial \Phi} + q^a \frac{\partial}{\partial p_a} - p_a \frac{\partial}{\partial q^a},\tag{5.23}$$

El campo vectorial (5.23) será considerado el generador infinitesimal de las transformaciones totales de Legendre.

5.2. Isometrías infinitesimales de Legendre

En esta sección, observaremos que las métricas utilizadas por la GTD hasta ahora no son invariantes bajo transformaciones infinitesimales de Legendre. Esto motiva el objetivo de encontrar una familia de métricas, lo más general posible, que sea invariante bajo estas transformaciones. Para lograr este objetivo utilizaremos las ecuaciones de Killing, de las cuales, encontraremos las condiciones que debe cumplir una métrica general para que sea invariante bajo transformaciones infinitesimales de contacto. En particular, las generadas por el campo (5.23). Las transformaciones totales de Legendre son un caso particular de estas transformaciones y son generadas por dicho campo vectorial. Iniciaremos los cálculos para sistemas con dos grados de libertad, en los que nos centraremos y analizaremos con mayor detenimiento los resultados encontrados. Posteriormente se harán cálculos para tres y cuatro grados de libertad. Finalmente se dará una primera versión de la generalización de los resultados para n grados de libertad.

Como se mencionó en el capítulo anterior, las familias de métricas utilizadas por la GTD son dos importantes:

$$G_T = \eta \otimes \eta + \Omega(\xi^a{}_b q^b p_a)(\chi^c{}_d dq^d \otimes dp_c)$$
(5.24)

у

$$G_P = \eta \otimes \eta + \Omega \sum_{i=1}^n \left[(q^i p_i)^{2k+1} dq^i \otimes dp_i \right] , \qquad (5.25)$$

en donde G_T es invariante bajo transformaciones discretas totales de Legendre y G_P es invariante bajo transformaciones parciales. Observamos que ninguna de estas métricas es invariante bajo transformaciones infinitesimales.

Tomemos el campo vectorial que genera la transformación parcial de las coordenadas q^i , p_i para una *i* fija (5.11). Resolvemos las ecuaciones de Killing usando este campo y la métrica G_P inavrainte bajo transformaciones parciales de Legendre.

$$\mathcal{L}_{X_L} G_P \neq 0. \tag{5.26}$$

Ahora tomamos la métrica G_T invariante bajo transformaciones totales de Legendre y apliquemos las ecuaciones de Killing usando el campo generador de transformaciones totales de Legendre X_L (5.23)

$$\mathcal{L}_{X_L} G_T \neq 0. \tag{5.27}$$

Como se muestra en estos casos, ninguna de las familias de métricas queda invariante bajo el flujo del campo vectorial que genera dichas transformaciones. Este resultado, nos lleva a buscar alguna familia de métricas, de forma general, que sí cumplan con estas simetrías. En particular nos interesará la simetría bajo el flujo del campo X_L dado por (5.23).

Consideremos un sistema de dos grados de libertad, esto es, un espacio fase \mathcal{T} de cinco dimensiones. Tomemos la métrica general para este espacio

$$G = G_{AB}(Z^C) \ dZ^A \otimes dZ^B \,, \tag{5.28}$$

en donde los índices son tomados del conjunto $\{1...5\}$. Como en todo el trabajo, consi-

deramos coordenadas ordenadas de Darboux, por lo que $Z^A \in \{q^a, p_a, \Phi\}$ para cada A.

El tensor métrico consta de 15 componentes independientes que debemos calcular a partir de las simetrías impuestas. La principal simetría es la de las transformaciones totales de Legendre, dada por

$$\mathcal{L}_{X_L} G = 0. \tag{5.29}$$

Este sistema de ecuaciones tiene un grado de libertad en la dirección de Φ . Esto se puede quitar una vez que la representación fundamental sea escogida [?]. Al escoger una 1-forma de contacto η junto con el campo vectorial asociado a esta 1-forma \mathcal{R}_{η} , podemos observar que η sigue el flujo generado por \mathcal{R}_{η} . Pediremos además, que la métrica cumpla dicha simetría por lo que impondremos

$$\mathcal{L}_{\mathcal{R}_n} G = 0. \tag{5.30}$$

A las métricas que cumplen (5.30) se les conoce como K-contact. Para cumplir la simetría bajo el flujo de Reeb, las componentes de la métrica quedan restringidas a no depender explícitamente de la coordenada Φ . De esta forma, el K-contact será

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_{AB}(q^a, p_a) \ dZ^A \otimes dZ^B \,. \tag{5.31}$$

Finalmente, la métrica de interés, será el K-contact que cumpla

$$\mathcal{L}_{X_L} \mathcal{G} = 0. \tag{5.32}$$

Al escribir la ecuaciones de Killing de forma explícita, observamos que se genera el

siguiente sistema de ecuaciones

$$\{F_1, h\} = 0 \tag{5.33}$$

$$\{F_2, h\} + q^1 F_1 + F_4 = 0 \tag{5.34}$$

$$\{F_3, h\} + q^2 F_1 + F_5 = 0 \tag{5.35}$$

$$\{F_4, h\} - p_1 F_1 - F_2 = 0 \tag{5.36}$$

$$\{F_5, h\} - p_2 F_1 - F_3 = 0 \tag{5.37}$$

$$[F_6, h] + 2q^1F_2 + 2F_8 = 0 (5.38)$$

$$[F_7, h] + q^2 F_2 + q^1 F_3 + F_9 = 0 (5.39)$$

$$\{F_8, h\} - p_1 F_2 + q^1 F_4 - F_6 + F_{13} = 0$$
(5.40)

$$\{F_9, h\} - p_2 F_2 + q^1 F_5 - F7 + F_{14} = 0$$
(5.41)

$$\{F_{10},h\} + 2q^2F_3 + 2F_{12} = 0 \tag{5.42}$$

$$\{F_{11},h\} + q^2 F_4 - p_1 F_3 - F_7 + F_{14} = 0$$
(5.43)

$$\{F_{12},h\} + q^2 F_5 - p_2 F_3 - F_{10} = 0 \tag{5.44}$$

$$\{F_{13},h\} - 2p_1F_4 - 2F_8 = 0 \tag{5.45}$$

$$\{F_{14},h\} - p_1F_5 - p_2F_4 - F_9 - F_{11} = 0$$
(5.46)

$$\{F_{15},h\} - 2p_2F_5 - 2F_{12} = 0, \qquad (5.47)$$

donde F_i representan las componentes desconocidas de la métrica y la operación $\{F_i, h\}$ está dada por (5.9).

En general, las métricas de variedades de contacto se escriben en forma de bloque. Usaremos esta técnica para construir nuestra métrica partiendo de algún punto. Utilizaremos algunos de los resultados encontrados por la GTD y nos basaremos en ellos para la construcción de los bloques. Supondremos que la métrica tendrá de forma general la siguiente estructura.

$$\mathcal{G} = \eta \otimes \eta + 2\Omega_a^{\ b}(q^c, p_c) \ dq^a \otimes dp_b \,. \tag{5.48}$$

Las componentes dadas por el bloque $\eta \otimes \eta$ nos dan un punto de partida para poder fijar algunas de las componentes. Con estas componentes fijas, sólo resta encontrar 9 componentes de la métrica, dadas por $\Omega_a^b(q^c, p_c)$. Observamos que la imposición de estas componentes genera una fuerte restricción sobre el sistema de ecuaciones encontrado en (5.33)-(5.47). Al resolver el sistema con las restricciones mencionadas, podemos encontrar que existe una única solución al sistema, dada por

$$\mathcal{G} = \eta \otimes \eta + 2\Omega(q^c, p_c) \ \epsilon_a{}^b \ dq^a \otimes dp_b \,, \tag{5.49}$$

para $\Omega(q^a, p_a)$ una función invariante de Legendre, esto significa, que tiene una solución no trivial a la ecuación

$$\{h,\Omega\} \equiv p_a \frac{\partial\Omega}{\partial q^a} - q^a \frac{\partial\Omega}{\partial p_a} = 0, \qquad (5.50)$$

y $\epsilon_a{}^b$ son las componentes de la matriz simpléctica

$$\epsilon = \begin{bmatrix} 0 & 1\\ -1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{5.51}$$

Observamos que det $\mathcal{G} = \Omega^4$ por lo que la métrica no es degenerada para $\Omega \neq 0$. Este resultado es relevante, pues ninguna de las métricas usadas en GTD tienen esta forma. La principal diferencia radica en que los tensores métricos usados en GTD contienen únicamente términos en las diagonales del segundo bloque $\xi^a_{\ b}$ y $\chi^a_{\ b}$, mientras que el término $\epsilon_a^{\ b}$ no es diagonal.

Tomemos la transformación discreta de Legendre dada por (4.5) en donde se hace el cambio de todas las coordenadas. Se puede observar que bajo esta transformación total discreta

$$\tilde{\mathcal{G}} = \tilde{\eta} \otimes \tilde{\eta} + 2\Omega(\tilde{q}^c, \tilde{p}_c) \ \epsilon_a^{\ b} \ d\tilde{q}^a \otimes d\tilde{p}_b \,.$$
(5.52)

La condición (5.50) implica que $\Omega(q^a, p_a) = \Omega(\tilde{q}^a, \tilde{p}_a)$. Así, podemos destacar que las métricas usadas en GTD tienen simetría de Legendre discreta, la cuál, no implica simetría infinitesimal; mientras que la simetría infinitesimal sí implica una discreta.

Aplicaremos el resultado obtenido en un ejemplo concreto que previamente se ha analizado con el formalismo de la GTD. Trataremos de observar, si la métrica encontrada genera las mismas soluciones ya analizadas por el programa y si se puede llegar a las conclusiones e interpretaciones ya presentadas por el mismo formalismo.

5.3. Interpretación termodinámica: Gas ideal

Consideremos el espacio de estados de equilibrio definido por $\varphi : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$ y dado por (??). La métrica inducida en este espacio estará dada por $g = \varphi^* \mathcal{G}$ y tendrá la forma

$$g = 2 \ \Omega \ \epsilon_a^{\ b} \ \Phi_{,bc} \ dq^a \otimes dq^c \,, \tag{5.53}$$



Figura 5.1: Orbitas del generado infinitesimal de Legendre X_{L_i} . En la izquierda observamos la proyección sobre el plano $q^i - p_i$ para las condiciones iniciales (2,0,0), (1,0,0) and (1/2,0,0).En al derecha, se observa la órbita de X_{L_i} en el espacio q^i, p_i, Φ para las mismas condiciones iniciales

en donde $\Phi_{,bc}$ es la segunda derivada del potencial Φ con respecto a las coordenadas de \mathcal{E} .

Tomemos el caso particular de una gas ideal molar en la representación de la entropía. Consideremos las coordenadas $q^1 = u$ la energía molar y $q^2 = v$ el volumen molar. El potencial será

$$s(u, v) = c_v \ln(u) + \log(v).$$
(5.54)

La metrica tendrá la forma

$$g_{\rm gi} = 2 \ \Omega \left(\frac{c_v}{u^2} - \frac{1}{v^2}\right) \ du \otimes dv, \tag{5.55}$$

y el determinante será

$$\det(g_{\rm gi}) = -\Omega^2 \left[\frac{\left(c_v v^2 - u^2 \right)^2}{(uv)^4} \right].$$
 (5.56)

De manera directa se puede calcular el escalar de curvatura en términos de las coordenadas del espacio de estados de equilibrio u, v. Sin embargo, es conveniente escribir el escalar de curvatura en términos de la densidad de energía $\rho = u/v$:

$$R_{\rm gi} = \frac{2\rho^2}{\Omega^3} \left[\frac{v^2 \left(\Omega \Omega_{,uv} - \Omega_{,u} \Omega_{,v}\right)}{\rho^2 - c_v} + \frac{4\Omega^2 c_v \rho}{\left(\rho^2 - c_v\right)^3} \right].$$
 (5.57)

Si pedimos que el escalar de curvatura $R_{\rm gi}$ sea cero, encontramos una ecuación adicional para la función Ω a la establecida anteriormente por $\{h, \Omega\} = 0$ (5.50). Al tratar de resolver el sistema incorporando la nueva ecuación, encontramos que el sistema es inconsistente. Esto significa que no se pueden cumplir ambas ecuaciones ((5.50) y $R_{\rm gi} = 0$) al mismo



Figura 5.2: Escalar de curvatura del espacio de estados de equilibrio del gas ideal. Si la función Ω es constante, el escalar de curvatura depende únicamente de la densidad de energía ρ . Se presenta la gráfica para la capacidad calorífica de un gas monoatómico $c_v = 3/2$ y $\Omega = 1$.

tiempo. Si suponemos que la función Ω es regular para valores positivos de ρ , el escalar de curvatura (5.57) es singular cuando $\rho = \sqrt{c_v}$. Para valores en donde $\rho > c_v$, observamos que el escalar de curvatura decae rápidamente a cero.

La interpretación recurrente en los trabajos de GTD, de asociar la interacción termodinámica de un sistema con el escalar de curvatura del espacio de estados de equilibrio, ya no es posible para este tipo de métricas dada la incompatibilidad encontrada. Por lo tanto, aplicando el formalismo de la GTD, que exige curvatura cero para sistemas sin interacción termodinámica [?, ?, HQuev:07] concluimos que las métricas de la forma (5.49) se deben descartar porque con ellas no se pueden describir sistemas termodinámicos físicos.

5.4. Métrica a partir de una estructura de contacto

Existen varias maneras de asignarle una métrica a una variedad de contacto. Una de ellas, es partiendo de ciertas simetrías que se busca que cumpla la métrica y con esta información resolver las ecuaciones de Killing. Este método es el usado en el grueso de este trabajo. Sin embargo, no es el único método. Se puede recurrir al tensor 1-1 ϕ conocido como cuasi estructura de contacto (3.23). Con este tensor se pueden definir métricas asociadas a él. (??).

Sea η la 1-forma de contacto de la GTD y \mathcal{R} el vector de Reeb, podemos encontrar la cuasi estructura de contacto ϕ al resolver de manera algebraica la ecuación (3.23). Existen 14 soluciones a esta ecuación para variedades de 5 dimensiones (lo cual implica que estamos trabajando con sistemas termodinámicos con dos grados de libertad) [18], las cuales, podemos escribir de manera explícita:

$$\phi_1 = \begin{bmatrix} 0 & p_2 \phi_{32} & -\frac{p_1}{\phi_{32}} & \phi_{24} p_1 + \phi_{25} \phi_{54} p_2 \phi_{32} & \frac{p_1 \phi_{54} \phi_{25} - p_2 \phi_{32} \phi_{24}}{\phi_{54}} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\phi_{32}} & \phi_{24} & \phi_{25} \\ 0 & \phi_{32} & 0 & \phi_{54} \phi_{25} \phi_{32} & -\frac{\phi_{24} \phi_{32}}{\phi_{54}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\phi_{54}} \\ 0 & 0 & 0 & \phi_{54} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\phi_2 = \begin{bmatrix} 0 & \phi_{12} & \phi_{13} & \phi_{14} & \phi_{15} \\ \phi_{21} & 0 & \phi_{23} & \phi_{24} & \phi_{25} \\ \phi_{31} & \phi_{32} & 0 & \phi_{34} & \phi_{35} \\ \phi_{41} & \phi_{42} & \phi_{43} & 0 & \phi_{45} \\ \phi_{51} & \phi_{52} & \phi_{53} & \phi_{54} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\phi_3 = \begin{bmatrix} 0 & p_2 \phi_{3,2} & -\frac{p_1}{\phi_{32}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\phi_{32}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{32} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\phi_{32}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\phi_{54}^{-1} \\ 0 & 0 & \phi_{53} & \phi_{54} & 0 \end{bmatrix}$$

$$(5.60)$$

$$\phi_{4} = \begin{bmatrix} 0 & p_{2} \phi_{32} & \frac{p_{1} (\phi_{53}\phi_{32}\phi_{24} - \phi_{54})}{\phi_{54}\phi_{32}} & \phi_{24}p_{1} & -\frac{p_{2} \phi_{32}\phi_{24}}{\phi_{54}} \\ 0 & 0 & \frac{\phi_{53}\phi_{32}\phi_{24} - \phi_{54}}{\phi_{54}\phi_{32}} & \phi_{24} & 0 \\ 0 & \phi_{32} & 0 & 0 & -\frac{\phi_{24}\phi_{32}}{\phi_{54}} \\ 0 & -\frac{\phi_{32}\phi_{53}}{\phi_{54}} & 0 & 0 & \frac{\phi_{53}\phi_{32}\phi_{24} - \phi_{54}}{\phi_{54}^{2}} \\ 0 & 0 & \phi_{53} & \phi_{54} & 0 \end{bmatrix}$$
(5.61)

$$\phi_{5} = \begin{bmatrix} 0 & p_{2} \phi_{32} & 0 & \frac{p_{1} \phi_{54}}{\phi_{32} \phi_{53}} & -\frac{p_{9}}{\phi_{53}} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\phi_{54}}{\phi_{32} \phi_{53}} & 0 \\ 0 & \phi_{32} & 0 & 0 & -\phi_{53}^{-1} \\ 0 & -\frac{\phi_{32} \phi_{53}}{\phi_{54}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{53} & \phi_{54} & 0 \end{bmatrix}$$
(5.62)

$$\phi_{6} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{\phi_{45}\phi_{53}p_{1}}{\phi_{42}} & -\frac{p_{1}}{\phi_{42}} & \frac{-p_{2}+p_{1}\phi_{25}\phi_{53}}{\phi_{53}} \\ 0 & 0 & -\frac{\phi_{45}\phi_{53}}{\phi_{42}} & -\phi_{42}^{-1} & \phi_{25} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\phi_{53}^{-1} \\ 0 & \phi_{42} & \phi_{42}\phi_{25}\phi_{53} & 0 & \phi_{45} \\ 0 & 0 & \phi_{53} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
(5.63)

$$\phi_{7} = \begin{bmatrix} 0 & \phi_{12} & \phi_{13} & \phi_{14} & \phi_{15} \\ \phi_{21} & 0 & \phi_{23} & \phi_{24} & \phi_{25} \\ \phi_{31} & \phi_{32} & 0 & \phi_{34} & \phi_{35} \\ \phi_{41} & \phi_{42} & \phi_{43} & 0 & \phi_{45} \\ \phi_{51} & \phi_{52} & \phi_{53} & \phi_{54} & 0 \end{bmatrix}$$
(5.64)

40

$$\phi_{8} = \begin{bmatrix} 0 & \phi_{12} & \phi_{13} & \phi_{14} & \phi_{15} \\ \phi_{21} & 0 & \phi_{23} & \phi_{24} & \phi_{25} \\ \phi_{31} & \phi_{32} & 0 & \phi_{34} & \phi_{35} \\ \phi_{41} & \phi_{42} & \phi_{43} & 0 & \phi_{45} \\ \phi_{51} & \phi_{52} & \phi_{53} & \phi_{54} & 0 \end{bmatrix}$$

$$(5.66)$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{p_{1}\phi_{24}\phi_{45}}{\phi_{35}} & p_{1}\phi_{24} & p_{2}\phi_{35} \\ 0 & 0 & -\frac{\phi_{24}\phi_{45}}{\phi_{45}} & \phi_{24} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\phi_{9} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{1}{\phi_{35}} & \phi_{24} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \phi_{35} \\ 0 & -\phi_{24}^{-1} & 0 & 0 & \phi_{45} \\ 0 & 0 & -\phi_{35}^{-1} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
(5.67)

$$\phi_{10} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -\frac{\phi_{34}(-p_2 \phi_{52} + \phi_{53}p_1)}{\phi_{52}} & \frac{-p_1 \phi_{52} - \phi_{34} \phi_{42}p_2 \phi_{52} + \phi_{34} \phi_{42} \phi_{53}p_1}{\phi_{52}^2} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\phi_{34} \phi_{53}}{\phi_{52}} & \frac{-\phi_{52} + \phi_{34} \phi_{53} \phi_{42}}{\phi_{52}^2} \\ 0 & 0 & 0 & \phi_{34} & -\frac{\phi_{34} \phi_{42}}{\phi_{52}} \\ 0 & \phi_{42} & \frac{-\phi_{52} + \phi_{34} \phi_{53} \phi_{42}}{\phi_{34} \phi_{52}} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{52} & \phi_{53} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
(5.68)

$$\phi_{11} = \begin{bmatrix} 0 & p_2 \phi_{45} \phi_{34} \phi_{52} & 0 & p_2 \phi_{34} & -\frac{p_1 + \phi_{34} \phi_{42} p_2}{\phi_{52}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\phi_{52}^{-1} \\ 0 & \phi_{45} \phi_{34} \phi_{52} & 0 & \phi_{34} & -\frac{\phi_{34} \phi_{42}}{\phi_{52}} \\ 0 & \phi_{42} & -\phi_{34}^{-1} & 0 & \phi_{45} \\ 0 & \phi_{52} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
(5.69)

$$\phi_{12} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{p_2 \phi_{54} \phi_{52}}{\phi_{34} \phi_{53}^2} & 0 & -\frac{\phi_{34} (-p_2 \phi_{52} + \phi_{53} p_1)}{\phi_{52}} & -\frac{p_2}{\phi_{53}} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\phi_{34} \phi_{53}}{\phi_{52}} & 0 \\ 0 & -\frac{\phi_{52} \phi_{54}}{\phi_{34} \phi_{53}^2} & 0 & \phi_{34} & -\phi_{53}^{-1} \\ 0 & \frac{\phi_{52}}{\phi_{34} \phi_{53}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{52} & \phi_{53} & \phi_{54} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\phi_{13} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{p_1 \phi_{43} \phi_{54}}{\phi_{52}} & \frac{-p_2 + p_1 \phi_{43} \phi_{24}}{\phi_{43}} & -\frac{p_1}{\phi_{52}} \\ 0 & 0 & -\frac{\phi_{43} \phi_{54}}{\phi_{52}} & \phi_{24} & -\phi_{52}^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & -\phi_{43}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{43} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{52} & \phi_{24} \phi_{43} \phi_{52} & \phi_{54} & 0 \end{bmatrix}$$

$$(5.71)$$

$$\phi_{14} = \begin{bmatrix} 0 & -ip_2 \phi_{35}\phi_{52} & \phi_{13} & -\frac{\phi_{54}p_1 \left(-p_2 + i\phi_{13}\right)}{\phi_{13}\phi_{52}} & -\frac{-p_2 \phi_{52}\phi_{35} + p_1}{\phi_{52}} \\ 0 & 0 & \frac{\phi_{13}}{p_1} & -i\frac{\phi_{54}}{\phi_{52}} & -\phi_{52}^{-1} \\ 0 & -i\phi_{35}\phi_{52} & 0 & \frac{\phi_{54}p_1}{\phi_{13}\phi_{52}} & \phi_{35} \\ 0 & -\frac{\phi_{35}\phi_{52}^2\phi_{13}}{\phi_{54}p_1} & -\frac{\phi_{13}\phi_{52}}{\phi_{54}p_1} & 0 & -i\frac{\phi_{13}\phi_{35}\phi_{52}}{\phi_{54}p_1} \\ 0 & \phi_{52} & i\frac{\phi_{13}\phi_{52}}{p_1} & \phi_{54} & 0 \end{bmatrix}$$
(5.72)

De estas cuasi estructuras de contacto podemos resolver la ecuación (??) y encontrar las métricas asociadas a cada una de éstas:

$$G_{1} = \begin{bmatrix} 1 & -p_{1} & -p_{2} & 0 & 0 \\ -p_{2} & p_{1}^{2} & p_{1} p_{2} & 0 & \phi_{32} \\ -p_{2} & p_{1} p_{2} & p_{2}^{2} & -\phi_{32}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & -\phi_{32}^{-1} & \phi_{24} & 0 \\ 0 & \phi_{32} & 0 & 0 & -\phi_{24}\phi_{32}^{2} \end{bmatrix}$$
(5.73)

$$G_{2} = \begin{bmatrix} 1 & -p_{1} & -p_{2} & 0 & 0 \\ -p_{1} & -\phi_{42} + p_{1}^{2} & -\phi_{52} + p_{2} p_{1} & 0 & \phi_{32} \\ -p_{2} & -\phi_{52} + p_{2} p_{1} & -\phi_{53} + p_{2}^{2} & \phi_{23} & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{23} & \phi_{24} & \phi_{34} \\ 0 & \phi_{32} & 0 & \phi_{34} & \phi_{35} \end{bmatrix}$$
(5.74)

$$G_{3} = \begin{bmatrix} 1 & -p_{1} & -p_{2} & 0 & 0 \\ -p_{1} & \phi_{32}^{2}\phi_{53} + p_{1}^{2} & p_{2}p_{1} & 0 & \phi_{32} \\ -p_{2} & p_{2}p_{1} & -\phi_{53} + p_{2}^{2} & -\phi_{32}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & -\phi_{32}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{32} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
(5.75)

$$G_{4} = \begin{bmatrix} 1 & -p1 & -p2 & 0 & 0 \\ -p1 & \phi_{3,2}^{2}\phi_{5,3} + p1^{2} & p1 p2 & 0 & \phi_{3,2} \\ -p2 & p1 p2 & -\phi_{5,3} + p2^{2} & -\phi_{3,2}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & -\phi_{3,2}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{3,2} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
(5.76)

$$G_{6} = \begin{bmatrix} 1 & -p_{1} & -p_{2} & 0 & 0 \\ -p_{1} & -\phi_{42} + p_{1}^{2} & p_{1} p_{2} & 0 & 0 \\ -p_{2} & p_{1} p_{2} & -\phi_{53} + p_{2}^{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\phi_{42}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\phi_{53}^{-1} \end{bmatrix}$$
(5.77)

$$G_{9} = \begin{bmatrix} 1 & -p_{1} & -p_{2} & 0 & 0 \\ -p_{1} & \frac{1+p_{1}^{2}\phi_{24}}{\phi_{24}} & p_{1} p_{2} & 0 & 0 \\ -p_{2} & p_{1} p_{2} & \frac{1+p_{2}^{2}\phi_{35}}{\phi_{35}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \phi_{24} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \phi_{35} \end{bmatrix}$$
(5.78)

$$G_{11} = \begin{bmatrix} 1 & -p_1 & -p_2 & 0 & 0 \\ -p_1 & -\phi_{42} + p_1^2 & \frac{1+p_1 p_2 \phi_{34}}{\phi_{34}} & 0 & -\phi_{45} \\ -p_2 & \frac{1+p_1 p_2 \phi_{34}}{\phi_{34}} & p_2^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \phi_{34} \\ 0 & -\phi_{45} & 0 & \phi_{34} & \phi_{34}^2 \phi_{42} \end{bmatrix}$$
(5.79)

$$G_{13} = \begin{bmatrix} 1 & -p_1 & -p_2 & 0 & 0 \\ -p_1 & p_1^2 & -\phi_{43} + p_1 p_2 & 0 & 0 \\ -p_2 & -\phi_{43} + p_1 p_2 & -\phi_{24}\phi_{43}^2 + p_2^2 & -\phi_{54} & 0 \\ 0 & 0 & -\phi_{54} & \phi_{24} & -\phi_{43}^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & -\phi_{43}^{-1} & 0 \end{bmatrix}$$
(5.80)

Algunas estructuras de contacto son exactamente iguales, por lo que no se han escrito. Tal es el caso de ϕ_2 , ϕ_7 y ϕ_8 que generan exactamente la misma métrica. Al resolver la ecuación algebraica (??) junto con la estructura de contacto, los tensores resultantes, no son necesariamente simétricos, por lo que no podrían jugar el papel de métrica Riemanniana en una variedad. Por ese motivo, se imponen ciertas condiciones para que dichos tensores se vuelvan simétricos y cumplan con los requisitos mínimos para ser considerados una métrica. Algunas de las estructuras de contacto (ϕ_5 , ϕ_{10} , ϕ_{14}) no generan tensores asociados que se puedan simetrizar, por lo que no se les puede ver como una métrica.

Tomemos en particular la estructura de contacto ϕ_2 (5.59) con la métrica asociada que genera G_2 (5.74). Suponemos que las componentes $\phi_{23} = \phi_{45} = -\Omega$ y $\phi_{54} = \phi_{32} = \Omega$, las

componentes $\phi_{12}, \phi_{13}, \phi_{14}, \phi_{15}$ que dan libres y las demás son cero. Obtenemos

$$\phi_2 = \begin{bmatrix} 0 & \phi_{12} & \phi_{13} & \phi_{14} & \phi_{15} \\ 0 & 0 & -\Omega & 0 & 0 \\ 0 & \Omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Omega \\ 0 & 0 & 0 & \Omega & 0 \end{bmatrix},$$
(5.81)

esta estructura de contacto nos genera la métrica asociada

$$G_{2} = \begin{bmatrix} 1 & -p_{1} & -p_{2} & 0 & 0 \\ -p_{1} & p_{1}^{2} & p_{2} p_{1} & 0 & \Omega \\ -p_{2} & p_{2} p_{1} & p_{2}^{2} & -\Omega & 0 \\ 0 & 0 & -\Omega & 0 & 0 \\ 0 & \Omega & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$
 (5.82)

Observamos que hemos recuperado la métrica \mathcal{G} que encontramos en (5.49). Por lo tanto, también existe una estructura de contacto que nos genera la métrica encontrada con el método de Killing.

Las demás estructuras de contacto pueden generar diferentes métricas, de las cuales, las funciones libres deberán cumplir ciertas relaciones para que cumplan con la simetría de Legendre infinitesimal. Estas métricas con estas funciones no se analizarán en este trabajo particular.

5.5. Más dimensiones

No obstante que el objetivo central de este trabajo era el de encontrar una familia de métricas invariantes bajo transformaciones infinitesimales de Legendre por medio de la solución de las ecuaciones de Killing para una métrica general en sistemas con dos grados de libertad, se intentó resolver, de manera superficial, para sistemas de más dimensiones. Primero se resolvió el sistema para tres grados de libertad y posteriormente para cuatro. Con estos primeros resultados, se trató de dar una solución general para n grados de libertad.

5.5.1. Sistemas con 3 grados de libertad

Tomamos un sistema con n = 3. El espacio fase de este sistema será una variedad de contacto de 7 dimensiones. El campo vectorial generador de las transformaciones de Legendre se calcula usando nuevamente (5.23). Resolvemos para que la métrica cumpla con ser *K*-contact (5.30) y posteriormente la simetría infinitesimal de Legendre (5.32). Encontramos un sistema de 28 incógnitas independientes por 28 ecuaciones. Usamos la suposición de que la métrica se podrá escribir en bloques y que tendrá la misma estructura (??). Fijando las componentes dadas por el bloque $\eta \times \eta$ encontramos que hay una solución no trivial:

$$\mathcal{G} = \eta \otimes \eta + \Omega(q^c, p_c) \ \epsilon_a{}^b dq^a \otimes dp_b \tag{5.83}$$

en donde

$$\epsilon = \begin{cases} 1 & \text{para } a > b \\ -1 & \text{para } a < b \\ 0 & \text{para } a = b \end{cases}$$
(5.84)

Esta métrica tiene representación matricial

$$\mathcal{G} = \begin{bmatrix}
1 & -p_1 & -p_2 & -p_3 & 0 & 0 & 0 \\
-_1 & p_1^2 & p_1 p_2 & p_1 p_3 & 0 & \Omega & \Omega \\
-p_2 & p_1 p_2 & p_2^2 & p_2 p_3 & -\Omega & 0 & \Omega \\
-p_3 & p_1 p_3 & p_2 p_3 & p_3^2 & -\Omega & -\Omega & 0 \\
0 & 0 & -\Omega & -\Omega & 0 & 0 & 0 \\
0 & \Omega & 0 & -\Omega & 0 & 0 & 0 \\
0 & \Omega & \Omega & 0 & 0 & 0 & 0
\end{bmatrix}.$$
(5.85)

Observamos que det $\mathcal{G} = 0$, por lo que esta matriz no define una variedad Riemanniana y por tanto, no existe una variedad fase. Obviamente, esto genera que no se pueda definir ningún tipo de mapeo φ y por ende, esta debe descartarse.

5.5.2. Sistemas con 4 grados de libertad

Una vez más, se repite el proceso anterior para sistemas con n = 4. Resolviendo las ecuaciones de Killing tanto para el vector de *Reeb* como para el generados infinitesimal de Legendre (5.23) se obtiene un sistema de 45 ecuaciones con 45 incógnitas independientes.

Suponiendo la misma estructura en bloque que las métricas pasadas, obtenemos

$$\mathcal{G} = \eta \otimes \eta + \Omega(q^c, p_c) \ \epsilon_a^{\ b} dq^a \otimes dp_b \tag{5.86}$$

en donde

$$\epsilon = \begin{cases} 1 & \text{para } a > b \\ -1 & \text{para } a < b \\ 0 & \text{para } a = b \end{cases}$$
(5.87)

Podemos ver que que todas las métricas que se han obtenido tienen exactamente la misma estructura y de forma general se pueden escribir igual. En este caso particular, det $\mathcal{G} = \Omega^8$. Si $\Omega \neq 0$, entonces la métrica no será degenerada. Como se puede observar, se empieza a fromar un cierto patrón, para *n* par.

Al tener un mayor número de grados de libertad, la cantidad de métricas que se pueden asociar a la variedad aumenta considerablemente. Al buscar superficialmente algunas otras métricas que cumplan los objetivos trazados, nos encontramos con una métrica escrita en términos de una matriz simpléctica. Esta métrica tiene la forma

$$\mathcal{G}_2 = \eta \otimes \eta + \Omega(q^c, p_c) \varepsilon_a{}^b dq^a \otimes dp_b , \qquad (5.88)$$

en donde $\varepsilon_a^{\ b}$ son las componentes de una matriz simpléctica dada por

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
(5.89)

Observamos que de la misma forma det $\mathcal{G}_2 = \Omega^8$. Es fácil observar que este tipo de métricas, en donde un término es adquirido por una matriz simpléctica, sólo tiene sentido en dimensiones pares, por lo que se puede llegar a generalizar para n par únicamente.

5.5.3. Sistemas de n grados de libertad

Con los pocos resultados obtenidos es relativamente sencillo poder dar una primera versión de la solución general para n grados de libertad. Por un lado, la métrica que resulta de resolver las ecuaciones de Killing tendrá exactamente la misma forma que las métricas adquiridas para dos, tres y cuatro grados de libertad

$$\mathcal{G} = \eta \otimes \eta + \Omega(q^c, p_c) \ \epsilon_a{}^b dq^a \otimes dp_b \tag{5.90}$$

en donde

$$\epsilon = \begin{cases} 1 & \text{para } a > b \\ -1 & \text{para } a < b \\ 0 & \text{para } a = b \end{cases}$$
(5.91)

En donde el determinate de esta métrica se comportará como

$$\det \mathcal{G} = \begin{cases} \Omega^{2n} & \text{para } n \text{ par} \\ 0 & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$
(5.92)

Las métricas compuestas por un bloque generado por una matriz simpléctica sólo tienen sentido para dimensiones pares y quedan generalizadas de la misma forma

$$\mathcal{G}_2 = \eta \otimes \eta + \Omega(q^c, p_c) \varepsilon_a^{\ b} dq^a \otimes dp_b \,, \tag{5.93}$$

para $\varepsilon_a{}^b$ las componentes de una matriz simpléctica.

6

Conclusiones

A lo largo de la evolución de las teorías físicas, se ha intentado darle a cada una de ellas un sustento matemático abstracto que pueda reproducir los conceptos fenomenológicos que subyacen en ellas. Una de las ramas de la física que más problemas ha presentado para este fin es la termodinámica. Varios personajes han intentado asociarle a la termodinámica una estructura geométrica que pueda reproducir los resultados clásicos. Desde Caratheodory hasta Ruppeiner, varias ideas han surgido, pero los resultados de ellas hasta hoy en día se encuentran en discusión y validación por los expertos.En los últimos años, el programa de la GTD ha tomado gran relevancia al introducir la invariancia de Legendre al formalismo geométrico.

La idea central parte del espacio fase de la termodinámica \mathcal{T} . Este espacio se puede ver como una variedad 2n + 1-dimensional dotada de una estructura de contacto. Esta estructura lleva a definir una clase de equivalencia de 1-formas de contacto $[\eta]$. En esta variedad se pueden colocar coordenadas locales de contacto o de Darboux $\{q^i, p_i, \Phi\}$ que representan a las variables extensivas del sistema, las variables intensivas y el potencial termodinámico respectivamente. Una vez construida esta variedad, se puede definir una subvariedad de Legendre $\mathcal{E} \subset \mathcal{T}$ llamada espacio de estados de equilibrio definida por el encaje $\varphi : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$. Esta subvariedad será el espacio físico de los sistemas termodinámicos y quedará caracterizada por las coordenadas q^i que corresponden a las variables extensivas del sistema o grados de libertad.

El encaje de Legendre φ cumple con la propiedad isotrópica $\varphi^* \eta = 0$ de donde se deduce la ecuación fundamental del sistema, la condición de equilibrio termodinámico y la primera ley de la termodinámica (4.9). El objetivo central de las diferentes ideas geométricas acerca de la termodinámica radican en dotar al espacio de estados de equilibrio con una métrica capaz de reproducir los resultados ya establecidos por la termodinámica clásica. En esta parte es donde los diferentes personajes y las diferentes teorías divergen. En algunos casos, las métricas han sido construidas a partir de propiedades estadísticas del sistema, en otros, a partir del Hessiano de la energía interna o de la entropía. El programa de la GTD presenta una forma de introducir una métrica G en el espacio fase de la termodinámica simétrica bajo transformaciones de Legendre. Esta métrica puede ser heredada a la subvariedad \mathcal{E} junto con todas sus propiedades por medio del encaje φ . Es así, como el formalismo de la GTD nos ofrece una nueva forma de dotar al espacio de estados de equilibrio con una métrica que resulte invariante bajo transformaciones de Legendre. Esta propiedad resulta interesante, pues quita la dependencia del potencial termodinámico de los resultados, y hace que no importe la representación que se escoja para trabajar. a pesar de las bondades que ofrece el formalismo de la GTD, también existen ciertos problemas que quedan aún sin resolver.

En el programa de la GTD, las métricas utilizadas hasta ahora son métricas invariantes bajo transformaciones de Legendre discretas. Sin embargo, estas métricas carecen de una simetría infinitesimal de Legendre. Las métricas utilizadas hasta ahora se han encontrado como soluciones particulares de un sistema de ecuaciones algebraicas [16] que permite una arbitrariedad muy grande. Con base en estos problemas, este trabajo se enfocó en tratar de encontrar la familia de métricas más general, para un sistema de dos grados de libertad, que resultara invariante bajo transformaciones infinitesimales de Legendre.

El método central que se utilizó para este objetivo, fue el de resolver las ecuaciones de Killing para una métrica genérica dado un campo vectorial generador de dichas transformaciones. Primero se le impuso a la métrica una simetría bajo el flujo del *Reeb* haciendo que la estructura fuera un *K-contact* (5.30). Esta simetría da como resultado que las componentes de la métrica no dependan explícitamente del potencial termodinámico.

Vistas las transformaciones de Legendre como un caso particular del grupo de transformaciones estricta de contacto, se trabajó con las funciones generadoras de campos Hamiltonianos de contacto y se encontró un campo vectorial generador de este tipo de transformaciones (5.23). Un caso particular de las transformaciones generadas por este campo vectorial son las transformaciones totales de Legendre. A este campo lo denominamos el campo vectorial generador de las transformaciones infinitesimales de Legendre.

Con el campo vectorial generador de las transformaciones de Legendre escrito en coorde-

nadas de contacto, se resolvieron las ecuaciones de Killing para una métrica general. Como solución, encontramos un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden (??)-(5.47) que satisfacen una solución no trivial (5.49). Con esta solución se recurrió a resultados previos tanto de la geometría de contacto como de la GTD para construir una métrica por bloques. Esto generó la familia de métricas

$$\mathcal{G} = \eta \otimes \eta + 2\Omega(q^c, p_c) \,\epsilon_a^{\ b} \, dq^a \otimes dp_b \,. \tag{6.1}$$

donde Ω es una función que depende de las coordenadas q^a y p_a y es explícitamente invariante de Legendre. Esto se puede escribir mediante la condición

$$\{h, \Omega\} = 0,$$
 (6.2)

donde h es la función Hamiltoniana que genera el campo vectorial infinitesimal de Legendre. Se observa que det $\mathcal{G} = \Omega^4$. Esto hace que si $\Omega \neq 0$ la métrica no sea degenerada. Este resultado es bastante diferente a las métricas utilizadas anteriormente en la GTD. Una de las exigencias más importantes del formalismo de la GTD es la asociación del escalar de la curvatura en el espacio de estados de equilibrio como medida de la interacción termodinámica del sistema. La métrica encontrada en este trabajo se intentó validar en este contexto.

La solución fue probada en un sistema de gas ideal caracterizado por las variables energía interna molar y volumen molar (u, v) en la representación de la entropía s. Se calculó $g = \varphi^* \mathcal{G}$ y el escalar de curvatura R_{GI} en términos de la densidad molar ρ (5.57). Los resultados encontrados no concuerdan con los exigidos por la GTD, pues $R_{GI} \neq 0$. Se puede observar para este sistema que dada una Ω regular, el único punto singular de R_{GI} aparece cuando $\rho = \sqrt{c_v}$, y para los valores en donde $\rho > c_v$ el escalar de curvatura decae rápidamente a cero (5.2). Esto nos lleva a pensar que el resultado podría tener cierto rango de aplicación, fuera del contexto de la GTD.

Aún cuando el objetivo central del trabajo era adquirí la métrica a partir de las ecuaciones de Killing, otras formas de adquirir la métrica también se exploraron. Tal es el caso de las métricas asociadas a una cuasi estructura de contacto ϕ . Se calcularon de forma explícita las 14 diferentes cuasi estructuras de contacto para 2 grados de libertad y 5 dimensiones del espacio fase resolviendo la ecuación (3.23). Las componentes de los tensores se dejaron como funciones genéricas de las coordenadas. Para cada una de las estructuras de contacto se calculó de manera algebraica el tensor métrico asociado correspondiente por medio de la ecuación (??). Los tensores resultantes, en términos de las componentes de las estructuras de contacto, no necesariamente resultaron tensores simétricos, propiedad importante para que el tensor métrico tenga sentido Riemanniano. A las componentes de los tensores $\phi's$ se les aplicaron ciertas condiciones para que el tensor métrico resultante fuera simétrico. Para algunas estructuras, no hubo condiciones que cumplieran las componentes para obtener un tensor métrico simétrico.

Con los tensores métricos asociados a las estructuras de contacto ϕ , pudimos observar que por lo menos una de esas estructuras puede recuperar la métrica calculada en un principio por la resolución de las ecuaciones de Killing. Esto nos indica que para la métrica (5.49) existe por lo menos una estructura de contacto de la cuál, esta métrica es asociada.

Finalmente, se aplicó de nuevo el método de las ecuaciones de Killing para resolver sistemas con un mayor número de grados de libertad. Primero se aplicó para sistemas con n = 3. Una vez más, se pidió que la métrica cumpliera con ser un K – contact. Como resultado se obtuvo un sistema de ecuaciones diferenciales. Suponiendo una vez más una métrica con estructura de bloques, se construyó una familia de métricas dad por

$$\mathcal{G} = \eta \otimes \eta + \Omega(q^c, p_c) \ \epsilon_a{}^b dq^a \otimes dp_b \,, \tag{6.3}$$

que resulta tener la misma forma que la métrica encontrada para n = 2. Se observó que para esta métrica det $\mathcal{G} = 0$, por lo que la métrica resulta ser degenerada y por ende no existe espacio de fase termodinámico a partir del cual se pueda aplicar el formalismo de la GTD.

Posteriormente se aplicó el método central para sistemas con n = 4. Una vez más, la familia de métricas tuvo exactamente la misma forma que las métricas anteriores (5.86). Se observó, en esta ocasión, que det $\mathcal{G} = \Omega^8$ por lo que si $\Omega \neq 0$ la métrica no será degenerada.

Con estos resultados se intentó dar una primera versión de un resultado generalizado para n grado de libertad. El resultado obtenido fue de la forma

$$\mathcal{G} = \eta \otimes \eta + \Omega(q^c, p_c) \ \epsilon_a{}^b dq^a \otimes dp_b \tag{6.4}$$

en donde

$$\epsilon = \begin{cases} 1 & \text{para } a > b \\ -1 & \text{para } a < b \\ 0 & \text{para } a = b \end{cases}$$
(6.5)

Lo único que cambia con respecto al número de grados de libertad n es el valor del

determinante, pues pudimos concluir que para estas familias de métricas

$$\det \mathcal{G} = \begin{cases} \Omega^{2n} & \text{para } n \text{ par} \\ 0 & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$
(6.6)

En los sistemas de cuatro grados de libertad, también pudimos encontrar otra familia de métricas que satisfacen las ecuaciones de simetría, pero que se pueden escribir en términos de una matriz simpléctica (5.88). Este tipo de familias métricas sólo tienen sentido para dimensiones pares, por lo que para n impar quedan indeterminadas. Así, también podemos generalizar estas métricas para cualquier dimensión en términos de las grados de libertad. Para n par, se tiene que

$$\mathcal{G}_2 = \eta \otimes \eta + \Omega(q^c, p_c) \varepsilon_a^{\ b} dq^a \otimes dp_b.$$
(6.7)

El determinate de esta familia de métricas es exactamente el mismo al de la familia encontrada a partir de las ecuaciones de Killing.

El objetivo original de este trabajo era encontrar la métrica más general invariante ante transformaciones infinitesimales de Legendre y se cumplió completamente para el caso de n = 2. Esta solución matemática, desafortunadamente, no cumplió con la condición física impuesta en la GTD, de tener curvatura cero para sistemas sin interacción termodinámica, y por lo tanto fue necesario descartarla. Esto significa que las métricas usadas hasta ahora en la GTD [10], que llamamos G_T y G_P en el capítulo 3 siguen siendo las más generales encontradas hasta ahora.

Para futuros trabajos, se deberá hacer un análisis más extenso y formal de las familias de métricas para cualquier dimensión, pues aquí se ofrece sólo una primera versión de estos resultados de forma superficial. Las cuasi estructuras de contacto nos brindan una forma bastante concreta de generar familias de métricas. Podría ser importante, el analizar las diferentes métricas que estas cuasi estructuras de contacto nos ofrecen en términos del formalismo de la GTD y su invariancia bajo transformaciones infinitesimales de Legendre.

El camino por recorrer hacia la geometrización de la termodinámica todavía es bastante largo. Se tienen una serie de teorías que plantean de diversas formas la manera en asignarle una métrica al espacio de estados de equilibrio y hacer que la teoría hasta ahora conocida por medio de la termodinámica *clásica* se reproduzca de manera consistente. En futuros trabajos se deberá analizar la viabilidad de encontrar una forma canónica matemática que sustente las métricas hasta ahora utilizadas por la GTD y que nos ofrezca un panorama mucho más claro. Un estudio detallado de los grupos y subgrupos de transformaciones de contacto nos pueden aclarar varias situaciones cerca de la misma topología en donde se encuentran las transformaciones de Legendre. Todo esto deberá hacerse con el fin de poder entender mejor la teoría y poder así, describir algunos sistemas que en principio no se han podido acoplar de manera clara a la teoría, tales como los sistemas fuera del equilibrio termodinámico.

Parte de los resultados de esta tesis fueron publicados en el artículo *Infinitesimal Legendre symmetry in the Geometrothermodynamics programme* de la revista Journal of Mathematical Physics 55, 083515 (2014); doi: 10.1063/1.4891921 que se muestre en el apéndice.

Apéndice



Infinitesimal Legendre symmetry in the Geometrothermodynamics programme

D. García-Peláez^{1,2,a)} and C. S. López-Monsalvo^{1,b)} ¹Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 70-543, 04510 México D.F., México ²Universidad Panamericana, Tecoyotitla 366. Col. Ex Hacienda Guadalupe Chimalistac, 01050 México D.F., México

(Received 20 May 2014; accepted 20 July 2014; published online 13 August 2014)

The work within the Geometrothermodynamics programme rests upon the metric structure for the thermodynamic phase-space. Such structure exhibits discrete Legendre symmetry. In this work, we study the class of metrics which are invariant along the infinitesimal generators of Legendre transformations. We solve the Legendre-Killing equation for a *K*-contact general metric. We consider the case with two thermodynamic degrees of freedom, i.e., when the dimension of the thermodynamic phase-space is five. For the generic form of contact metrics, the solution of the Legendre-Killing system is unique, with the sole restriction that the only independent metric function – Ω – should be dragged along the orbits of the Legendre generator. We revisit the ideal gas in the light of this class of metrics. Imposing the vanishing of the scalar curvature for this system results in a further differential equation for the metric function Ω which is not compatible with the Legendre invariance constraint. This result does not allow us to use Quevedo's interpretation of the curvature scalar as a measure of thermodynamic interaction for this particular class. © 2014 AIP Publishing LLC. [http://dx.doi.org/10.1063/1.4891921]

I. INTRODUCTION

The mathematical nature of thermodynamics has been largely explored over the past few decades. Motivated by the early works on metric formulations for thermodynamics of Rao and Fisher¹ together with the later developments in contact geometry applied to thermodynamics of Mrugala,^{2,3} the central goal of the Geometrothermodynamics (GTD) programme has been to provide a Legendre covariant description of thermal phenomena.⁴ However, a consistent way for obtaining Legendre invariant metrics whose associated geometry reveals some physical property has been lacking since the birth of the programme. The difficulty of such a task lies in the fact that *discrete* Legendre transformations do not form a group. A summary of the various challenges for the formalism can be found in Refs. 5 and 6.

The metric based programme for geometric thermodynamics presented here considers Legendre symmetry as a fundamental building block for the formalism. From a physical point of view, this is consistent with the fact that in an experiment certain thermodynamic quantities may not be suitable for direct measurement, e.g., in a system with two degrees of freedom represented by the molar internal energy, where the molar entropy and volume are the relevant variables. In such cases, one can use "conjugate" variables, e.g., temperature and pressure, which are easier to control without changing the physical content of the conclusions, one can reach from such experiment. This is an indication that thermodynamics is independent of the potential used to describe a particular phenomena. Therefore, in any metric theory of thermodynamics, if one assigns some physical

0022-2488/2014/55(8)/083515/8/\$30.00

55, 083515-1

© 2014 AIP Publishing LLC

a) dgarciap@up.edu.mx

b) cesar.slm@correo.nucleares.unam.mx

significance to quantities derived from the metric tensor, one should demand Legendre covariance. In this respect, the GTD programme has been successful.

A natural way to set up a geometric theory of thermodynamics has been to endow the working space with a metric. It is at this point that different geometric programmes for thermodynamics diverge. On the one hand, there is the fluctuation based formalism of Ruppeiner,^{7,8} where the metric tensor and its associated line element account for the probability of fluctuations.⁹ On the other hand, the GTD programme equips the thermodynamic phase-space (cf. Sec. II) with a Legendre invariant metric which is carried over to the equilibrium space by means of an embedding map. This guarantees that the curvature of the thermodynamic potential. However, its relationship with thermodynamic fluctuation theory is a bit less clear. Finally, let us note that the metrics used within the GTD programme, albeit being manifestly invariant under discrete Legendre transformations. This should be contrasted with the case of Special Relativity, where the flat Minkowski metric is Lorentz invariant and is carried along the orbits of the infinitesimal generators of the Lorentz group.¹⁰

In this work, we explore the infinitesimal generators of the Legendre transformations and construct a family of metrics whose isometry group contains these generators. This turns out to be a very strong constraint on the possibilities for Legendre invariant metrics. In particular, none of the metrics used within the GTD programme satisfies such a constraint.

We solve the system defined by the Killing equation associated with the generators of Legendre transformations for an arbitrary metric in the thermodynamic phase-space with the sole restriction of being a K-contact, i.e., that the Reeb vector field associated with the choice of contact form generates an extra symmetry. We perform the analysis by considering a system with two thermodynamic degrees of freedom which can be easily extended to the general case.

The paper is organised as follows. In Sec. II, we provide a brief introduction to the geometry of thermodynamics and the general framework of the GTD programme. In Sec. III, we introduce the contact Hamiltonians as the generating functions for the infinitesimal generators of Legendre transformations. This approach to Legendre symmetry in thermodynamics has been largely studied by Rajeev.¹¹ In Sec. IV, we present a class of metrics whose isometries are given by infinitesimal Legendre transformations. We note that these metrics are *conformally* associated with the contact structure of the thermodynamic phase space. Additionally, we show that none of the metrics used in the GTD programme belongs to this class. We explore the geometry of the space of equilibrium in the light of the induced metrics for this class and observe that we can no longer use the GTD interpretation for the curvature scalar. Finally, in Sec. V we provide some closing remarks.

II. THE GEOMETRIC STRUCTURE OF THERMODYNAMICS

Let us consider the standard set-up (cf. Ref. 5). To geometrise a thermodynamic system with n degrees of freedom, we use a 2n + 1 dimensional contact manifold – the thermodynamic phase-space \mathcal{T} – whose coordinates represent the thermodynamic variables. This allows us to take into account the First-Law of thermodynamics in a natural way through the maximal Legendre sub-manifold – the equilibrium space \mathcal{E} – which is uniquely determined once the thermodynamic fundamental relation is known, i.e., when the thermodynamic potential has been fully specified.

Let us choose a contact 1-form field – $\eta \in T^*T$ – whose elements belong to the class generating the contact structure of the phase-space at each point. Such a field satisfies the non-integrability condition

$$\eta \wedge (\mathrm{d}\eta)^n \neq 0. \tag{1}$$

Contact manifolds have the property that, in every patch $\mathcal{U} \subset \mathcal{T}$ there is a set of local coordinates – Darboux's coordinates $\{\Phi, q^a, p_a\}$, with a = 1...n – such that at every point $x \in \mathcal{U}$ the contact 1-form can be written as

$$\eta = \mathrm{d}\Phi - p_a \mathrm{d}q^a, \tag{2}$$

083515-3 D. García-Peláez and C. S. López-Monsalvo

where the Einstein's sum convention has been used. We will follow such convention unless otherwise stated.

The space of equilibrium states is the maximal dimensional integral sub-manifold embedded in \mathcal{T} satisfying the isotropic condition

$$\varphi^*(\eta) = 0. \tag{3}$$

Here, the map $\varphi : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$ is called a Legendre embedding. In Darboux coordinates, this is equivalent to the First-Law since

$$\varphi^*(\eta) = \varphi(\mathrm{d}\Phi - p_a \mathrm{d}q^a) = \left(\frac{\partial\Phi}{\partial q^a} - p_a\right) \mathrm{d}q^a = 0. \tag{4}$$

The last equality serves as the definition of the conjugate variables to the q^{a} 's through

$$\Phi = \Phi(q^a) \quad \text{and} \quad p_a = \frac{\partial \Phi}{\partial q^a}.$$
 (5)

This is simply the well-known statement that the fundamental relation $\Phi(q^a)$ completely specifies the thermodynamic system and, thus, the embedding φ .

Additional to the contact structure, the GTD programme endows the thermodynamic phasespace with two families of metrics (cf. Sec. III in Ref. 5),

$$G_{\rm T} = \eta \otimes \eta + \Omega \left(\xi^a_{\ b} q^b p_a \right) \left(\chi^c_{\ d} \, \mathrm{d} q^d \otimes \mathrm{d} p_c \right) \tag{6}$$

and

$$G_{\rm P} = \eta \otimes \eta + \Omega \sum_{i=1}^{n} \left[\left(q^{i} p_{i} \right)^{2k+1} \mathrm{d} q^{i} \otimes \mathrm{d} p_{i} \right].$$
⁽⁷⁾

Both have the discrete Legendre transformations as isometries, the former is only invariant under *total* Legendre transformations and the latter is also invariant under partial Legendre transformations. We will clarify the role of Legendre symmetry in the GTD programme in Sec. III. Here, Ω is a Legendre invariant function of the Darboux coordinates, ξ_b^a and χ_b^a are $n \times n$ diagonal arrays of numbers providing the algebraic structure of each family and k is an integer.

These families have been tested in various situations where the thermodynamic behaviour of a particular system is fully specified, allowing us to interpret the manifestly Legendre invariant curvature scalar associated with the induced metric in \mathcal{E} as a "measure of thermodynamic interaction" (cf. Quevedo⁴).

III. LEGENDRE TRANSFORMATIONS AND CONTACT HAMILTONIANS

Legendre transformations are particular examples of contact diffeomorphisms, i.e., symmetries of the contact structure of the thermodynamic phase-space. Notice that a transformation of \mathcal{T} which leaves invariant its contact structure necessarily preserves the equilibrium space, since the tangent bundle of a Legendre sub-manifold is completely contained in the contact structure of \mathcal{T} (cf. Arnold¹²). In this sense, a contact diffeomorphism of the thermodynamic phase-space, is a symmetry compatible with the First-Law.

In thermodynamics, a Legendre transformation exchanges the role of the extensive and intensive variables of a given fundamental function $\Phi(q^a)$. Consider the map $\phi : \mathcal{T} \to \mathcal{T}$ which leaves the contact structure invariant, that is, such that

$$\phi^* \eta = f \eta$$
 where $f : \mathcal{T} \to \mathbb{R}^+$. (8)

The requirement that the function f to be strictly positive simply means that we are considering only diffeomorphisms which preserve the orientation of the contact structure.

Let us call a differentiable function $h : T \to \mathbb{R}$ a contact Hamiltonian. The Hamiltonian vector field generated by h is defined through the relation

$$h = \eta \left[X_h \right]. \tag{9}$$

083515-4 D. García-Peláez and C. S. López-Monsalvo

J. Math. Phys. 55, 083515 (2014)

In local Darboux coordinates it takes the form¹²

$$X_{h} = \left(h - p_{a}\frac{\partial h}{\partial p_{a}}\right)\frac{\partial}{\partial \Phi} + \left(\frac{\partial h}{\partial q^{a}} + p_{a}\frac{\partial h}{\partial \Phi}\right)\frac{\partial}{\partial p_{a}} - \left(\frac{\partial h}{\partial p_{a}}\right)\frac{\partial}{\partial q^{a}}.$$
 (10)

Note that for every contact 1-form in the class defining the contact structure, there is a unique vector field R_{η} such that

$$\eta[R_{\eta}] = 1 \quad \text{and} \quad d\eta[R_{\eta}] = 0. \tag{11}$$

The vector field R_{η} is called the Reeb vector field associated with the contact form η , and it is generated by the Hamiltonian h = 1. In local Darboux coordinates, the Reeb vector field is simply

$$R_{\eta} = \frac{\partial}{\partial \Phi}.$$
 (12)

Consider the contact Hamiltonian given by

$$h = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} \left(q^{i^{2}} + p_{i}^{2} \right), \tag{13}$$

then, its associated vector field is

$$X_{L} = \left[\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} \left(q^{i^{2}} - p_{i}^{2}\right)\right] \frac{\partial}{\partial \Phi} + q^{a} \frac{\partial}{\partial p_{a}} - p_{a} \frac{\partial}{\partial q^{a}}.$$
 (14)

It is straightforward to obtain the flow of X_L . To acquire an intuition of the orbits of the contact Hamiltonian (14), let us consider the simpler generating Hamiltonian

$$h_i = \frac{1}{2} \left(q^{i^2} + p_i^2 \right).$$
(15)

Note that the Hamiltonian (13) is simply the sum over *i* of the individual functions (15) and, therefore, the Hamiltonian vector field (14) will be simply the sum of each Hamiltonian vector field

$$X_{L_i} = \frac{1}{2} \left(q^{i^2} - p_i^2 \right) \frac{\partial}{\partial \Phi} + q^i \frac{\partial}{\partial p_i} - p_i \frac{\partial}{\partial q^i} \quad \text{(no sum over } i\text{)}.$$
(16)

To find the contact transformation generated by X_{L_i} , we need to integrate the flow

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}Z_i^A = X_{L_i}^a,\tag{17}$$

where the Z^A are the Darboux coordinates of \mathcal{T} . Writting up explicitly the equations for the coordinate transformation we have

$$\frac{d}{dt}\Phi_{(i)} = \frac{1}{2} \left[q^{i^2} - p_i^2 \right],$$
(18)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_i = q^i,\tag{19}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}q^{i} = -p_{i}.\tag{20}$$

These are the contact equivalent to Hamilton's equations. The last two, Eqs. (19) and (20), can be integrated immediately to obtain

$$p_{(i)}(t) = p_{(i)}\cos(t) + q^{(i)}\sin(t),$$
(21)

$$q^{(i)}(t) = -p_{(i)}\sin(t) + q^{(i)}\cos(t),$$
(22)

and substituting these into (18), we find

$$\Phi_{(i)}(t) = \frac{1}{2} \left[q^{i^2} - p_i^2 \right] \sin(t) \cos(t) - p_{(i)} q^{(i)} \sin^2(t) + \Phi \quad \text{(no sum over } i\text{)}.$$
(23)



FIG. 1. Orbits of the infinitesimal Legendre symmetry generator X_{L_i} . On the left, we show the projected orbits on the (q^i, p_i) -plane. The initial conditions are taken over the *i*th ordered triad (q^i, p_i, Φ) . Here, we consider the initial conditions (2, 0, 0), (1, 0, 0), and (1/2, 0, 0). On the right, we show the shape of the orbits of X_{L_i} on the space (q^i, p_i, Φ) for the same initial conditions.

Note that the value of $\Phi_{(i)}(t)$ is not fixed along the orbit of X_{L_i} (see Figure 1). Given an initial condition on the q^i axis where the initial value $\Phi(0) = \Phi$ is a constant, there are exactly four points along the orbit of X_{L_i} with the same value of Φ , each corresponding to a $n\pi/2$ rotation in the (q^i, p_i) -plane. Thus, we see that a $\pi/2$ rotation yields the partial Legendre transformation interchanging the *i*th pair of conjugate variables,

$$\tilde{\Phi}_{(i)} \equiv \Phi_{(i)} \left(\frac{\pi}{2}\right) = \Phi - p_i q^i \quad \text{(no sum over } i\text{)}, \tag{24}$$

$$\tilde{p}_i \equiv p_i \left(\frac{\pi}{2}\right) = q^i, \tag{25}$$

$$\tilde{q}^i \equiv q^i \left(\frac{\pi}{2}\right) = -p_i. \tag{26}$$

In the rest of this work, we will consider the generator for the total Legendre transformations, which interchanges every pair of conjugate variables and the expression for the Legendre transformed potential $\tilde{\Phi}$, Eq. (24) above, will have an implicit sum over all the indices *i*.

IV. INFINITESIMAL LEGENDRE ISOMETRIES

The aim of this work is to obtain a class of metrics which remain invariant along the flow of the Hamiltonian vector field X_L generating total Legendre transformations. For simplicity, let us consider the particular case with two degrees of freedom. All the results in this section can be easily extended to the general case and shall be presented elsewhere. Thus, consider the metric for the five-dimensional thermodynamic phase-space

$$G = G_{AB}(Z^C) \,\mathrm{d}Z^A \otimes \mathrm{d}Z^B,\tag{27}$$

where the capital indices are taken over the set $\{1...5\}$. Here, the components of the metric tensor $-G_{AB}$ – are general functions of the phase-space coordinates Z^C . As before, we work in *ordered* Darboux coordinates, therefore, $Z^A \in \{\Phi, q^a, p_a\}$ for each A.

From the symmetry of the metric tensor, there are 15 independent components in (27) that must be determined by solving the Killing equation

$$\mathcal{L}_{X_L} G = 0. \tag{28}$$

This system of equations has a freedom along the direction of Φ which can be removed once a fundamental representation is chosen (cf. Ref. 5). Thus, choosing a contact 1-form $-\eta$ – in the class generating the contact structure, together with its associated Reeb vector field R_{η} [cf. Eq. (12), above], we see that η is dragged along the orbits of the Reeb flow. We will demand that the metric (27) shares this symmetry. A metric satisfying the equation

$$\mathcal{L}_{R_n} G = 0 \tag{29}$$

J. Math. Phys. 55, 083515 (2014)

is called a *K*-contact. This imposes the restriction on the metric components of being independent of the coordinate Φ . Therefore, instead of solving the general Legendre-Killing system, Eq. (28), we will find the family of *K*-contact metrics with Legendre symmetries obtained from

$$\mathcal{L}_{X_I}\mathcal{G} = 0,\tag{30}$$

where the K-contact G has the form

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_{AB}(q^a, p_a) \, \mathrm{d} Z^A \otimes \mathrm{d} Z^B. \tag{31}$$

The form of the metric \mathcal{G} remains quite general. Following the standard formulation of contact metric manifolds,¹³ a contact metric is typically written in blocks. Thus, let us assume that the structure of \mathcal{G} is of the form

$$\mathcal{G} = \eta \otimes \eta + 2\Omega_a^{\ b}(q^c, p_c) \,\mathrm{d}q^a \otimes \mathrm{d}p_b, \tag{32}$$

where we have fixed 6 out of 15 independent components of (31) and we only need to determine the nine remaining functions $\Omega_a^{\ b}(q^c, p_c)$. This form of the metric is very restrictive with respect to the system (30), and yields a unique class of solutions of the form

$$\mathcal{G} = \eta \otimes \eta + 2\Omega(q^c, p_c) \,\epsilon_a^{\ b} \,\mathrm{d}q^a \otimes \mathrm{d}p_b, \tag{33}$$

where $\Omega(q^a, p_a)$ is a non-vanishing, manifestly Legendre invariant function, i.e., it is a non-trivial solution to the equation

$$\{h, \Omega\} \equiv p^a \frac{\partial \Omega}{\partial q^a} - q^a \frac{\partial \Omega}{\partial p^a} = 0, \qquad (34)$$

and $\epsilon_a^{\ b}$ are the components of the symplectic matrix

$$\epsilon = \begin{bmatrix} 0 & 1\\ -1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{35}$$

This result is relevant since it excludes all the metric tensors used in the GTD programme. The similarity of (33) with the GTD metrics, Eqs. (6) and (7), is deceiving since the arrays ξ_b^a and χ_b^a are diagonal, whereas ϵ_a^b is not. Thus, one can question the invariance of the GTD metrics altogether. One can see here that discrete invariance does not imply infinitesimal invariance, while the converse is true. Indeed, the GTD metrics change along the orbits of X_L but recover their initial value every $\pi/2$ rotation.

This structure yields results which are significantly different with those stemming from the standard metric approaches for geometric thermodynamics.

A. Thermodynamic interpretation: Revisiting the ideal gas

Let us consider the equilibrium space defined through the embedding relations (3)–(5). In this case, we can equip the equilibrium space \mathcal{E} with a metric tensor $-g = \varphi^* \mathcal{G}$ – induced by the embedding map $\varphi : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$ [cf. Sec. II]. Thus, the induced metric on \mathcal{E} is simply

$$g = 2 \Omega \epsilon_a^{\ b} \Phi_{,bc} \, \mathrm{d}q^a \otimes \mathrm{d}q^c, \tag{36}$$

where $\Phi_{,ab}$ stands for the second derivatives of the thermodynamic potential Φ with respect to the coordinates of \mathcal{E} .

In the particular case of the molarised ideal gas in the entropy representation, let us choose $q^1 = u$ the molar energy, $q^2 = v$ the molar volume, and the potencial $\Phi(u, v)$ as the entropy density *s*. The potential is written as

$$s(u, v) = c_v \ln(u) + \log(v).$$
 (37)

Thus, with our choice of coordinates and the fundamental relation (37), the induced metric, Eq. (36), becomes

$$g_{ig} = 2 \Omega \left(\frac{c_v}{u^2} - \frac{1}{v^2} \right) du \otimes dv,$$
(38)



FIG. 2. Scalar curvature of the space of equilibrium states for the ideal gas. Note that if the metric function Ω is constant, the scalar curvature depends only on one parameter, the energy density ρ . Here we have used the heat capacity for a monatomic gas, $c_v = 3/2$ and $\Omega = 1$.

whose determinant is given by

$$\det(g_{ig}) = -\Omega^2 \left[\frac{(c_v v^2 - u^2)^2}{(uv)^4} \right].$$
 (39)

It is straightforward to compute the curvature scalar in terms of the equilibrium space coordinates u and v. However, it is more convenient to write it up in terms of the energy density $\rho = u/v$, so that

$$R_{\rm ig} = \frac{2\rho^2}{\Omega^3} \left[\frac{v^2 \left(\Omega \Omega_{,uv} - \Omega_{,u} \Omega_{,v}\right)}{\rho^2 - c_v} + \frac{4\Omega^2 c_v \rho}{\left(\rho^2 - c_v\right)^3} \right]. \tag{40}$$

Note that if we demand that such a scalar vanishes, we have an extra equation for Ω , apart from (34). However, such a system is inconsistent. Moreover, assuming that the Legendre invariant function Ω (as a function of ρ) is regular for values of $\rho > 0$, we observe that the curvature scalar (40) is singular when the value of the energy density coincides with the square root of the heat capacity. Beyond that point, i.e., for values of $\rho > \sqrt{c_v}$, the curvature scalar decays very rapidly to zero. Thus, for this type of metrics, one can no longer keep the interpretation associating the curvature of the space of equilibrium states as a measure of thermodynamic interaction without any restriction, as it is normally done within the GTD programme. It is interesting that the curvature of the class of metrics we presented here exhibits a limit of applicability, presumably related with the thermodynamic limit itself (see Figure 2).

V. CONCLUSIONS

In this work, we have obtained a class of metrics for the thermodynamic phase-space \mathcal{T} that are carried along the orbits of the infinitesimal generator of the total Legendre transformations in the case of two thermodynamic degrees of freedom. We have restricted the analysis to metrics which are fully compatible with the choice of one-form η in the class generating the contact structure of \mathcal{T} . We do this by demanding that the metric has the Reeb vector field associated with η as a symmetry. Such metrics are called *K*-contacts. The Legendre-Killing system resulting from (30) is a set of 15 independent first order partial differential equations. By imposing the usual block decomposition for the metric of Riemannian contact manifolds [cf. Eq. (32)], we fix 6 of the 15 unknowns and the remaining 9 are solved to yield a unique class of solutions of a single manifestly Legendre invariant function $\Omega(q^a, p_a)$.

The solution obtained here excludes all the metrics used in various programmes of geometric thermodynamics. This should be expected since, in general, discrete invariance does not imply infinitesimal symmetry. However, the class presented here stems from a differential system that probes the geometric structure of the thermodynamic phase-space consistently with the choice of contact 1-form.

We revisited the space of equilibrium states for the ideal gas. We observed that we can no longer interpret the curvature of \mathcal{E} as a measure of thermodynamic interaction since such requirement is inconsistent with the constraint that the metric function Ω should satisfy. Moreover, rewriting the scalar curvature in terms of the energy density of the system, it becomes singular when the numerical value of the energy density coincides with the square root of the heat capacity at constant volume. This might be an indication of the domain of applicability of the formalism in terms of the thermodynamic limit. This issue remains to be explored.

ACKNOWLEDGMENTS

D.G.P. was funded by a CONACYT Scholarship. C.S.L.M. acknowledges financial support of a DGAPA-UNAM Post-doctoral Fellowship. The authors are thankful to Alessandro Bravetti and Francisco Nettel for helpful comments.

- ¹C. R. Rao, "Information and the accuracy attainable in the estimation of statistical parameters," *Breakthroughs in Statistics* (Springer, 1992), Vol. 235.
- ² R. Mrugala, "Geometrical formulation of equilibrium phenomenological thermodynamics," Rep. Math. Phys. **14**, 419–427 (1978).
- ³ R. Mrugala, "Submanifolds in the thermodynamic phase space," Rep. Math. Phys. 21, 197–203 (1985).
- ⁴H. Quevedo, "Geometrothermodynamics," J. Math. Phys. 48, 013506 (2007).
- ⁵ A. Bravetti, C. S. Lopez-Monsalvo, F. Nettel, and H. Quevedo, "The conformal metric structure of geometrothermodynamics," J. Math. Phys. 54, 033513 (2013).
- ⁶A. Bravetti, C. S. Lopez-Monsalvo, F. Nettel, and H. Quevedo, "Representation invariant geometrothermodynamics: Applications to ordinary thermodynamic systems," J. Geom. Phys. **81**(0), 1–9 (2014).
- ⁷G. Ruppeiner, "Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory," Rev. Modern Phys. 67, 605–659 (1995).
- ⁸G. Ruppeiner, "Thermodynamics: A Riemannian geometric model," Phys. Rev. A 20(4), 1608–1613 (1979).
- ⁹G. Ruppeiner, "Breaking of Supersymmetry and Ultraviolet Divergences in Extended Supergravity," Springer Proc. Phys. 153, 179–203 (2014), arXiv:1309.0901 [gr-qc].
- ¹⁰ J. Stewart, *Advanced General Relativity*, Cambridge Monographs on Mathematical Physics (1991).
- ¹¹S. G. Rajeev, "A Hamilton Jacobi formalism for thermodynamics," Annl. Phys. 323, 2265–2285 (2008).
- ¹² V. I. Arnold and S. P. Navikov, *Dynamical Systems IV* (Springer, 2000).
- ¹³D. Blair, Riemannian Geometry of Contact and Symplectic Manifolds (Birkhauser, 2010).

Bibliografía

- [1] W. Greiner, Thermodynamics and statistical mechanics. Springer, 1997.
- [2] R. Kubo, Thermodynamics: An advanced course with problems and solutions. John Wiley and sons, 1968.
- [3] R. Mrugala, "On contact and metric structure on the thermodynamic spaces," *Reports* on Mathematical Physics, 1996.
- [4] C. R. Rao, "Information and the accuracy attainable in the estimation of statistical parameters," *Breakthroughs in Statistics*, vol. 235, 1992.
- [5] F. Weinhold and J. Chem *Phys.*, vol. 63, pp. 279–296, 1975.
- [6] G. Ruppeiner, "Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory," *Reviews of Modern Physics*, vol. 67, pp. 605–659, July 1995.
- [7] D. Johnston and W. Janke, "Information geometry, one, two, three, and four," Acta. Phys. Polon., vol. 34, 2003.
- [8] H. Quevedo, "Geometrothermodynamics of black holes," General Relativity and Gravitation, vol. 40, pp. 971–984, May 2008.
- [9] J. Aman and N. Pidokrajt, "Geometry of higher-dimensional black hole thermodynamics," Gen. Rel. Grav., vol. 38, 2006.
- [10] H. Quevedo and M. N. Quevedo, "Fundamentals of Geometrothermodynamics," ArXiv e-prints, Nov. 2011.
- [11] A. Bravetti, C. S. Lopez-Monsalvo, F. Nettel, and H. Quevedo, "Representation invariant geometrothermodynamics: Applications to ordinary thermodynamic systems," *Journal of Geometry and Physics*, vol. 81, no. 0, pp. 1 – 9, 2014.
- [12] C. P. Boyer, "Completely Integrable Contact Hamiltonian Systems and Toric Contact Structures on $S^2 \times S^3$," SIGMA, vol. 7, p. 58, June 2011.

- [13] S. Kobayshi and N. K., Foundations of Differential Geometry. John Wiley and sons, 1963.
- [14] H. Callen, Thermodynamics and an introduction to thermostatistics. John Wiley and sons, 1985.
- [15] T. Frankel, The geometry of physics: An introduction. Cambridge University Press, 1997.
- [16] H. Quevedo, "Geometrothermodynamics," Journal of Mathematical Physics, vol. 48, p. 013506, Jan. 2007.
- [17] A. Bravetti, C. S. Lopez-Monsalvo, F. Nettel, and H. Quevedo, "The conformal metric structure of Geometrothermodynamics," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 54, p. 033513, Mar. 2013.
- [18] D. Blair, Riemannian Geometry of Contact and Symplectic Manifolds. Birkhauser, 2010.