



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**ESTUDIO DE ESPECTROS DE MATRICES ALEATORIAS COMO SERIES DE
TIEMPO**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
GAMALIEL TORRES VARGAS

TUTOR PRINCIPAL

DR. RUBEN YVAN MAARTEN FOSSION
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

DR. JUAN CARLOS LÓPEZ VIEYRA
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES - UNAM

DR. JOSÉ ANTONIO SANTIAGO GARCÍA
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

MÉXICO, D. F. NOVIEMBRE 2013



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**ESTUDIO DE ESPECTROS DE MATRICES ALEATORIAS COMO SERIES DE
TIEMPO**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
GAMALIEL TORRES VARGAS

TUTOR PRINCIPAL
DR. RUBEN YVAN MAARTEN FOSSION
INSTITUTO NACIONAL DE GERIATRÍA / C3

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR
DR. JUAN CARLOS LÓPEZ VIEYRA
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES - UNAM
DR. JOSÉ ANTONIO SANTIAGO GARCÍA
UAM CUAJIMALPA

MÉXICO, D. F. NOVIEMBRE 2013

SINODALES:

- Dr. Alejandro Frank Hoeflich (ICN - UNAM)
- Dr. José Antonio Santiago García (UAM Cuajimalpa)
- Dr. Ricardo Lino Mansilla Corona (CEIICH - UNAM)
- Dr. Rubén Y. M. Fossion (Instituto Nacional de Geriátría / C3)
- Dr. Sergio Adrián Lerma Hernández (Universidad Veracruzana)

*Dedicado a la memoria de
Ana María Arroyo Cruz*

Agradecimientos

Agradezco el soporte financiero recibido por parte de CONACYT. Agradezco todas las facilidades y apoyo que me brindaron en el Instituto Nacional de Geriátría (Institutos Nacionales de Salud) en el marco del proyecto DI-PI-002/2012. Agradezco a la red temática Envejecimiento, Salud y Desarrollo Social por la beca brindada. Agradezco el apoyo económico recibido por parte del proyecto especial de Conacyt clave I010/266/2011 C-410-11 con responsable técnico el Dr. Alejandro Frank del Instituto de Ciencias Nucleares de la UNAM. Agradezco el apoyo económico recibido por parte del proyecto de Ciencia Básica de Conacyt CB-2011-01-167441 con responsable técnico el Dr. Rubén Fossion del Instituto Nacional de Geriátría de los Institutos Nacionales de Salud.

Agradezco a mi tutor, el Dr. Rubén Fossion, quién supo contagiarme el interés por el estudio de series de tiempo. Agradezco su guía, así como su enorme apoyo, paciencia y aliento para la realización del presente trabajo.

Agradezco al Dr. José Antonio Santiago García por toda la motivación que me dió, la mayoría de las veces sin que fuera su intención hacerlo. También le agradezco el apoyo que me brindó para emprender lo que parecía era un buen proyecto, así como su paciencia en los momentos difíciles posteriores.

Agradezco al Dr. Juan Carlos López Vieyra por sus sugerencias y valiosos comentarios hechos durante las comidas de los viernes durante casi dos años.

Quiero darle mi más grande y profundo agradecimiento a mi madre, Margarita Vargas Arroyo, ya que sin su apoyo no hubiera sido posible mi ingreso a la maestría y tampoco mi permanencia después de algunos eventos desafortunados. También agradezco a mi padre, Amado Torres Rivera, por su motivación y apoyo.

Agradezco a Edgar Osiel Ángeles Hernández y familia, Hugo García Tecocoatzi, Victor Hugo Flores Soto y Marco Vladimir Lemus Yañez por abrirme las puertas de su casa.

Agradezco a mis hermanos Nahum y Edgar por todo su apoyo.

Agradezco a Cecilio Tapia Ignacio por sus ánimos y motivación.

Agradezco a mi novia, Maribel Ruiz Rivera, por su paciencia en la conclusión de este trabajo.

PUBLICACIONES:

- El artículo *Random matrix spectra as a time series* fue aceptado para su publicación en la revista *Physical Review E - Rapid Communications*.
- El trabajo “*Statistical study of quantum excitation spectra and matrix eigenspectra: Interpretation as a time series*” presentado en el XXXVI Symposium on Nuclear Physics (7-10/enero/2013 Cocoyoc, México), fue publicado como parte de las memorias del evento en un volumen del *IOP Journal of Physics: Conference Series*.

Índice general

Resumen	1
Introducción	3
1. Análisis de series de tiempo	5
1.1. Tipos de series de tiempo	6
1.2. Análisis de Fourier	8
1.3. Detrended Fluctuation Analysis (DFA)	10
1.4. Singular Value Decomposition (SVD)	13
1.5. Singular Spectrum Analysis (SSA)	16
1.5.1. Extracción de tendencias y oscilaciones con SSA	18
2. Teoría de matrices aleatorias (RMT)	29
2.1. Ensamblés Gaussianos clásicos	31
2.2. Unfolding	33
2.3. Medidas estadísticas de fluctuación espectral	37
2.3.1. Distribución de espaciamentos del vecino más cercano (NNSD)	37
2.3.2. Varianza del número de niveles Σ^2	39
2.3.3. Δ_3	40
3. Unfolding adaptado a los datos	43
3.1. Unfolding de ensambles de espectros mediante SVD	43
3.2. Unfolding de espectros individuales mediante SSA	49
3.2.1. Interpolación entre ensambles Gaussianos clásicos	55
Conclusiones y perspectivas	67
A. Principal Component Analysis (PCA)	69
Bibliografía	81

Resumen

En este trabajo interpretamos a los espectros de eigenvalores ordenados de matrices aleatorias finitas como series de tiempo. Aplicamos técnicas adaptadas a los datos del análisis de señales para descomponer cada espectro en modos de tendencia y fluctuación claramente diferenciados, evitando de esta manera, posibles errores en los resultados introducidos por las técnicas de unfolding estándar. Mostramos que los modos de fluctuación son invariantes de escala y siguen diferentes leyes de potencias para ensambles Poisson y Gaussianos, logrando distinguir ya durante el unfolding entre ambos casos.

Abstract

Spectra of ordered eigenvalues of finite Random Matrices are interpreted as a time series. Data-adaptive techniques from signal analysis are applied to decompose the spectrum in clearly differentiated trend and fluctuation modes, avoiding possible artifacts introduced by standard unfolding techniques. The fluctuation modes are scale invariant and follow different power laws for Poisson and Gaussian ensembles, which already during the unfolding allows to distinguish the two cases.

Introducción

Ha sido conjeturado que las fluctuaciones en los niveles de energía de los espectros de excitación de sistemas cuánticos obedecen leyes universales que pueden ser descritas por medio de la teoría de matrices aleatorias (RMT) [1]. Esta conjetura ha sido verificada en una amplia variedad de sistemas cuánticos, desde sistemas bidimensionales tales como los billares cuánticos y cavidades de microondas, hasta sistemas de muchos cuerpos tales como átomos, puntos cuánticos, hadrones y núcleos atómicos [2–6]. De gran importancia y previo a los estudios estadísticos de un espectro de excitación cuántico, es el procedimiento de *unfolding* el cual tiene dos finalidades: (i) separar el comportamiento de la densidad de niveles global $\bar{\rho}(E)$, de las fluctuaciones locales $\tilde{\rho}(E)$, y (ii) reescalar los espaciamientos entre niveles de energía a un espaciamiento promedio unitario tal que diferentes sistemas, con diferentes comportamientos globales, puedan ser comparados con las predicciones de RMT. En el procedimiento de unfolding tradicional (ver e.g. [7]), un mapeo de la secuencia de niveles de energía reales $E(i) = \{E_1, \dots, E_N\}$, a una secuencia de niveles adimensionales $\epsilon(i) = \{\epsilon_1, \dots, \epsilon_N\}$, $E(i) \rightarrow \epsilon(i) \equiv \bar{\mathcal{N}}[E(i)] = \int_{-\infty}^{E(i)} \bar{\rho}(E') dE'$, realiza este proceso. Aquí, $\bar{\mathcal{N}}[E]$ es una aproximación suave a la función de densidad acumulativa o función escalón $\mathcal{N}[E]$. Para los niveles unfoldeados, la densidad de niveles promedio es igual a 1.

El procedimiento de unfolding es simple si una predicción teórica para la densidad de niveles promedio $\bar{\rho}(E)$, es conocida. Por ejemplo, la fórmula de Weyl en el caso de billares cuánticos, la distribución semicircular en el caso de ensambles Gaussianos clásicos, y la distribución normal en el caso de ensambles Poissonianos. En la ausencia de una expresión teórica para $\bar{\rho}(E)$, un unfolding local puede ser aplicado, sin embargo, este procedimiento solo puede ser usado para estudiar correlaciones de corto alcance. Otra alternativa es modelar el comportamiento de la densidad global con un polinomio en la energía, pero en este caso el grado del mismo debe ser cuidadosamente elegido para evitar resultados erróneos [5, 6, 8]. Recientemente fue introducido un enfoque de series de tiempo como un método para estudiar las propiedades de las fluctuaciones de los niveles de energía [6, 9]. En tal aproximación, las fluctuaciones $\tilde{\mathcal{N}}[E] = \mathcal{N}[E] - \bar{\mathcal{N}}[E]$ (desviaciones de la energía de excitación unfoldeada de su valor promedio n), también conocida como la función δ_n , son interpretados como una serie de tiempo discreta. Diferentes técnicas del análisis de series de tiempo tales como el análisis

espectral de Fourier [6, 9] y el análisis de fluctuación destendenciada (DFA, por sus siglas en inglés) [10] han sido aplicadas para estudiar tales fluctuaciones de los niveles en los sistemas de RMT. En particular, fue mostrado que las fluctuaciones en los niveles de energía de los sistemas cuánticos que obedecen la estadística GOE se comportan como ruido $1/f$, mientras que las fluctuaciones en los niveles de energía de sistemas que obedecen la estadística de Poisson se comportan como ruido Browniano $1/f^2$. Los casos intermedios se comportan como $1/f^\beta$ con $1 < \beta < 2$ [6]. Sin embargo, los resultados obtenidos por esta aproximación pueden ser también bastante sensitivos al procedimiento de unfolding particular [6, 8]. Una técnica adaptada a los datos fue empleada para detectar y corregir falsas correlaciones introducidas al realizar un unfolding polinomial en la serie de tiempo de fluctuaciones [11, 12]. Por otra parte, ha sido sugerido que un método auto-consistente podría ser la aproximación más apropiada para llevar a cabo el procedimiento de unfolding [5].

En este trabajo proponemos interpretar directamente la secuencia de niveles de energía reales, $E(i)$, como una serie de tiempo. En el Capítulo 1 introducimos las ideas básicas del análisis de series de tiempo. En el Capítulo 2 hacemos un repaso de la teoría de matrices aleatorias (RMT). Finalmente en el Capítulo 3 mostramos los resultados de aplicar las técnicas adaptadas a los datos denominadas Singular Value Decomposition (SVD) y Singular Spectrum Análisis (SSA) [13, 14], la primera a un ensamble Poisson y GOE de series $E(i)$, donde cada una de ellas es interpretada como una serie de tiempo monótona y muestreada regularmente, mientras que la segunda técnica es aplicada a una sola serie $E(i)$. En este último caso, a modo de comparación, calculamos además las medidas de fluctuación tradicionales tales como NNSD y Δ_3 . Mostramos que en ambos casos, tales técnicas descomponen la función de energía en una manera auto-consistente en una parte global y una parte localmente fluctuante, es decir, $E(i) = \bar{E}(i) + \tilde{E}(i)$, lo cual permite extraer conclusiones inequívocas acerca de la parte fluctuante durante el procedimiento de unfolding mismo. Por último aplicamos el SSA para estudiar la interpolación entre sistemas Poisson y GOE.

Capítulo 1

Análisis de series de tiempo

En este capítulo introducimos las ideas básicas del análisis de series de tiempo [15–19]. Una *serie de tiempo* es una colección de observaciones de alguna variable hechas secuencialmente en el tiempo. En la literatura aplicada, las series de tiempo son a menudo llamadas señales. En literatura más teórica una serie de tiempo es una realización observada o medida de un proceso estocástico. Muchos datos en una amplia variedad de campos tales como la economía, física, ingeniería, medicina, demografía, el medio ambiente, control de procesos y otras áreas de la investigación científica son a menudo colectados en la forma de series de tiempo.

El análisis de series de tiempo trata con los métodos estadísticos para analizar y modelar una secuencia ordenada de observaciones. Es demasiado optimista pensar que un proceso complejo pueda ser completamente descrito en términos de una serie de tiempo, sin embargo, es asumido que la serie caracteriza algún o algunos aspectos interesantes del proceso y que un análisis apropiado de la misma proporcionará información útil al respecto. Si bien, mucha teoría estadística ha sido desarrollada para estudiar muestras aleatorias de observaciones independientes e idénticamente distribuidas, la característica especial del análisis de series de tiempo es el hecho de que las observaciones sucesivas usualmente no son independientes y que el análisis debe tomar en cuenta el orden temporal de las observaciones. Así, algunas de las finalidades del análisis de series de tiempo es lograr el entendimiento de la dinámica o la estructura dependiente del tiempo de las observaciones de una única serie (análisis de series de tiempo univariadas), de tal manera que seamos capaces de detectar regularidades en las observaciones de una variable y podamos de este modo predecir de manera precisa observaciones futuras, o en caso de estudiar varias series a la vez, poder determinar las relaciones más importantes entre ellas (análisis de series de tiempo multivariadas).

Existen dos principales aproximaciones al análisis de series de tiempo; la aproximación en el dominio del tiempo y la aproximación en el dominio de la frecuencia. La aproximación en el dominio del tiempo, cuyo desarrollo histórico tuvo lugar dentro de la estadística matemática,

trata de explicar las correlaciones entre puntos adyacentes en el tiempo en términos de una dependencia del valor actual sobre los valores pasados. Así, la aproximación en el dominio del tiempo se enfoca en modelar algún valor futuro de una serie de tiempo como una función paramétrica de los valores actual y pasados. Por otra parte, la aproximación en el dominio de la frecuencia se centra principalmente en encontrar variaciones periódicas o sistemáticas en los datos y evaluar la varianza asociada a cada una de ellas. Puesto que su desarrollo histórico tuvo lugar en el ámbito de la ingeniería de las comunicaciones, algunos de los términos comúnmente empleados en esta aproximación son los de energía, potencia y frecuencia. Las dos aproximaciones no son exclusivas sino más bien complementarias, y en muchos casos, para series largas, las dos aproximaciones pueden producir resultados similares. En otros casos, la formulación en el dominio de la frecuencia puede servir para llevar a cabo un cálculo, conceptualmente en el dominio del tiempo, de una manera más conveniente.

1.1. Tipos de series de tiempo

Considere una serie de variables aleatorias¹ X_1, X_2, \dots, X_T . En general, una colección de variables aleatorias, \mathbf{X}_t , indexadas por t es referida como un proceso estocástico. Los valores observados de un proceso estocástico son referidos como una realización del proceso estocástico. Es claro que no hay sólo una realización del proceso, sino, en principio, un número arbitrario de realizaciones las cuales tienen todas las mismas propiedades estadísticas. De este modo, podemos también considerar un proceso estocástico como la totalidad de todas sus posibles realizaciones. Si bien, antes mencionamos que una serie de tiempo es un conjunto de observaciones x_t , cada una registrada a un tiempo específico t , a fin de proporcionar un marco estadístico que tome en cuenta la posible naturaleza impredecible de observaciones futuras, podemos suponer que cada observación es un valor realizado de una cierta variable aleatoria X_t . De esta manera es posible definir a una serie de tiempo \mathbf{x}_t como una realización (o parte de una realización) de un proceso estocástico² \mathbf{X}_t . En el análisis de series de tiempo, el índice (o parámetro) t frecuentemente tomará los siguientes conjuntos de valores $\{0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$, $\{1, 2, 3, \dots\}$, $[0, \infty)$ o $(-\infty, \infty)$. Usualmente el término series de tiempo puede referirse tanto a los datos como al proceso del cual son una realización.

Una serie de tiempo se dice que es *discreta* si las observaciones son hechas solamente a tiempos específicos. En este caso la serie suele denotarse como $\mathbf{x}_t = \{x_1, x_2, \dots, x_T\}$. Si por

¹Una variable aleatoria es una función la cual asigna un número a cada posible resultado de un experimento.

²Si una serie de tiempo puede ser predicha de manera exacta, se dice que es *determinística*. Si los valores futuros de la serie de tiempo son sólo parcialmente determinados por sus valores pasados, tal que las predicciones exactas son imposibles, entonces se dice que la serie de tiempo es *estocástica*. En este caso los valores futuros tienen una cierta distribución de probabilidad la cual es condicionada por un conocimiento de los valores pasados de la serie. La mayoría de las series de tiempo de interés son de este tipo.

otra parte, las observaciones son registradas continuamente sobre algún intervalo de tiempo se dice que la serie de tiempo es *continua* y usualmente se denota como $\mathbf{x}(t)$ ³.

Sea \mathbf{x}_t , $t = 0, \pm 1, \dots$, una serie de tiempo discreta de valores reales, y sea M un número entero positivo. Entonces la serie de tiempo se dice que es *periódica* de período M , si M es el segundo mejor entero para el cual

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_{t+M} \quad (1.1)$$

para todo entero t . Si $\mathbf{x}(t)$, $-\infty < t < \infty$, es una serie de tiempo continua de valores reales o complejos, se dice que es *periódica* de período P ($P > 0$), si P es el entero más pequeño para el cual

$$\mathbf{x}(t + P) = \mathbf{x}(t) \quad (1.2)$$

para todo t .

Una serie de tiempo se dice que es *estrictamente estacionaria* si su distribución de probabilidad conjunta no se ve afectada por un cambio en el origen del tiempo. Una serie de tiempo se dice que es *débilmente estacionaria* si el comportamiento general de la serie permanece igual en el tiempo, es decir, las observaciones fluctúan alrededor de un nivel promedio constante con varianza constante sobre el período observado. Así, la estacionariedad implica un tipo de equilibrio estadístico o estabilidad en los datos. Si las observaciones de una serie de tiempo discreta son x_1, x_2, \dots, x_T entonces su promedio será

$$\bar{x} = \mu_x = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T x_t \quad (1.3)$$

y la varianza

$$s^2 = \sigma_x^2 = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T (x_t - \bar{x})^2 \quad (1.4)$$

Una serie de tiempo es *no estacionaria* si no parece tener un nivel promedio y/o exhibe un comportamiento a la deriva.

En las aplicaciones prácticas usualmente solamente tenemos una serie de tiempo, es decir, solo contamos con una realización de algún proceso estocástico, sin embargo para ser capaces de estimar el valor esperado o la varianza del proceso estocástico, deberíamos contar con más de una realización de este proceso. La asunción de *ergodicidad* quiere decir que los momentos

³Recordemos que una variable aleatoria discreta puede ser tratada como una variable aleatoria continua y asignada una correspondiente función de densidad de probabilidad. En base a lo anterior, en este trabajo trataremos a la secuencia discreta de energías $\{E_1, E_2, \dots, E_N\}$ como una serie de tiempo continua y la denotaremos como $E(i)$, mientras que al i -ésimo elemento de la serie lo denotaremos como E_i .

de la muestra, los cuales son calculados sobre la base de una serie de tiempo (realización del proceso estocástico) con un número finito de observaciones, convergen (en algún sentido) para $T \rightarrow \infty$ a los correspondientes momentos de la población (totalidad de todas las posibles realizaciones del proceso). Sin embargo, para que un proceso estocástico sea ergódico tiene que estar en equilibrio estadístico, es decir, tiene que ser estacionario.

Una serie de tiempo se dice que es *lineal* [20] si es posible reproducir sus propiedades estadísticas a partir únicamente del espectro de potencias y la distribución de probabilidad, sin tener en cuenta las fases de Fourier. Si la serie no cumple con las condiciones anteriores se dice entonces que es *no lineal*. En el análisis de series de tiempo lineales algunas de las aproximaciones más importantes están vinculadas al hecho de que la superposición es válida y a que las aproximaciones en el dominio de la frecuencia son directamente utilizables. Para series de tiempo no lineales la superposición no es válida y las aproximaciones en el dominio de la frecuencia no son muy útiles en general.

1.2. Análisis de Fourier

Una tarea común en el análisis de series de tiempo es determinar si una fluctuación específica está presente en nuestro conjunto de observaciones (detección), así como obtener los valores de los parámetros que describen a esta fluctuación (estimación). A menudo, lo anterior no es una tarea fácil debido principalmente a la presencia de ruido y a que podría tratarse de una serie de tiempo muy complicada. Para facilitar la detección y estimación de fluctuaciones específicas dentro de la serie, ésta es proyectada en una base la cual abarca el intervalo de observaciones. Puesto que frecuentemente el tipo de fluctuaciones que estamos buscando son fluctuaciones periódicas, una elección natural de la base sería aquella consistente de funciones periódicas simples tales como los senos y cosenos. El análisis de Fourier es el mecanismo por medio del cual es posible llevar a cabo esta descomposición [21–24].

El análisis de Fourier es un proceso que consiste básicamente en descomponer una señal en una combinación de ondas sinusoidales, cada una con una cierta frecuencia f y amplitud $A(f)$. El espectro de potencias es una representación de esta descomposición. Para calcularlo, es necesario primero determinar la amplitud $A(f)$ de cada componente. La potencia $P(f)$ a frecuencia f es igual, al cuadrado del valor absoluto de la amplitud, $P(f) = |A(f)|^2$. El espectro de potencias es obtenido graficando la potencia $P(f)$ como una función de la frecuencia f , y nos muestra cual es la importancia relativa de cada una de las frecuencias componentes.

En la práctica, el espectro de potencias $P(f)$ puede ser calculado como el cuadrado del valor absoluto de la transformada de Fourier de la serie de tiempo. El espectro de potencias

de una serie periódica tiene un número discreto de picos, los cuales indican las frecuencias dominantes que componen la serie. El espectro de potencias de una serie aleatoria es continuo y plano debido a que no hay frecuencias dominantes presentes. Por analogía con la luz blanca, la cual esta compuesta de todas las frecuencias en igual cantidad, una serie de tiempo aleatoria es también llamada *ruido blanco*. El espectro de potencias de una serie de tiempo no periódica pero correlacionada es también continuo, pero debido a las correlaciones algunas escalas de frecuencias contribuirán más a la serie que otras, por ejemplo, el ruido que contiene un exceso de componentes de frecuencia baja se dice que tiene un espectro de ruido corrido al rojo.

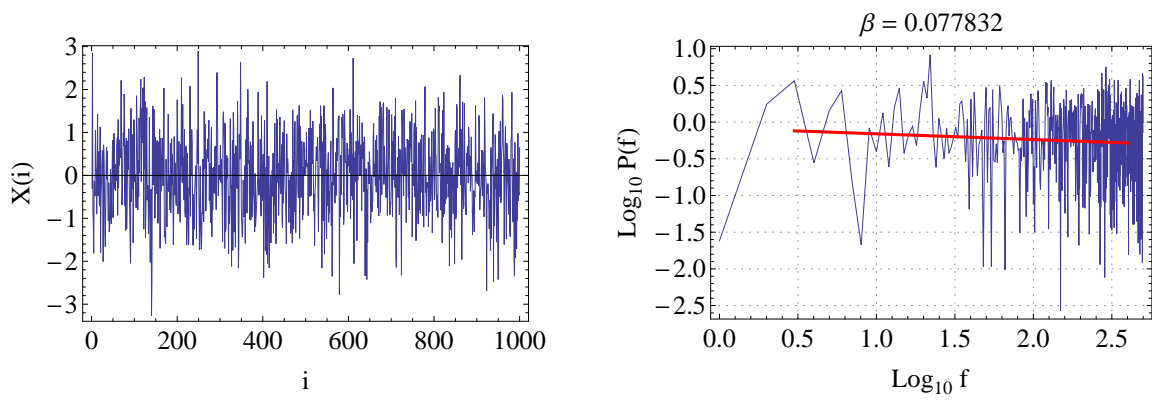


Figura 1.1: Gráfica de una serie de ruido blanco con $N = 1000$ elementos (izquierda) y su correspondiente espectro de potencias en escala log-log (derecha). El espectro exhibe un comportamiento de ley de potencias $P(f) \sim 1/f^\beta$ con $\beta \approx 0$.

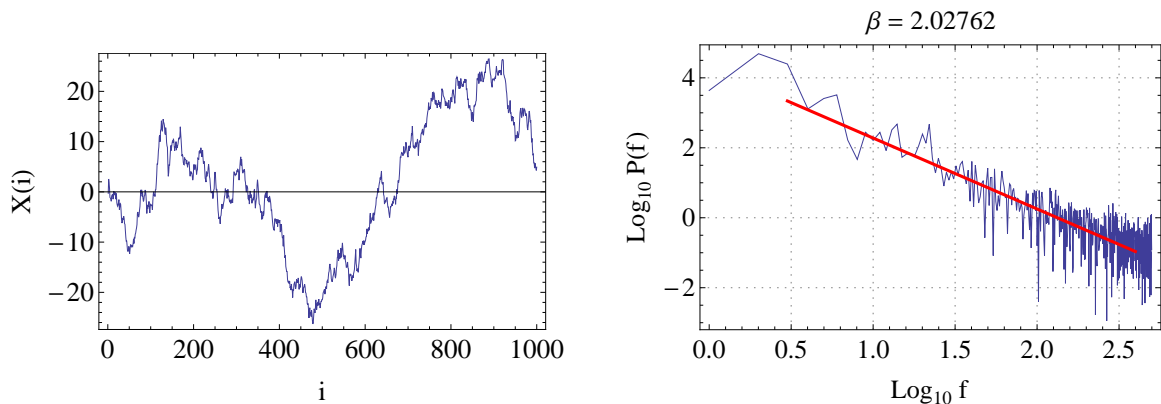


Figura 1.2: Gráfica de una serie de ruido Browniano (integración del ruido blanco de la imagen anterior) con $N = 1000$ elementos (izquierda) y su correspondiente espectro de potencias en escala log-log (derecha). El espectro exhibe un comportamiento de ley de potencias $P(f) \sim 1/f^\beta$ con $\beta \approx 2$.

Una serie de tiempo es fractal, cuando fragmentos de la serie de tiempo son estadísticamente auto-similares a la serie de tiempo original. En este caso, el espectro de potencias debe también ser un invariante de escala y satisfacer una ley de potencias $P(f) \sim 1/f^\beta$, donde β es el *exponente de densidad espectral*, siendo $\beta = 0$ para el ruido blanco como se muestra en la Figura 1.1 y $\beta = 2$ para ruido Browniano (integración del ruido blanco) mostrado en la Figura 1.2. En una representación log-log, la ley de potencias se traslada a una línea recta, siendo β la pendiente de dicha recta. Cuando $\beta = 0$ no hay correlaciones, cuando $0 < \beta < 1$ hay correlaciones, y si $-1 < \beta < 0$ existen anticorrelaciones [25].

1.3. Detrended Fluctuation Analysis (DFA)

El Detrended Fluctuation Analysis (DFA) es un técnica de análisis de series de tiempo que nos permite estudiar las propiedades de escalamiento de una serie de tiempo minimizando el efecto de tendencias no estacionarias. En concreto, el DFA nos permite detectar las correlaciones de largo alcance presentes en series de tiempo no estacionarias y, al mismo tiempo, evitar la detección errónea de aparentes correlaciones de largo alcance que en realidad son el resultado de la no estacionariedad de la serie. Este método ha sido exitosamente aplicado en series de tiempo de intervalos entre latidos [26] y otras señales fisiológicas [27, 28], así como para estudiar espectros nucleares [11, 29].

El algoritmo del DFA trabaja de la siguiente manera. Consideremos, en general, una serie de tiempo $X(i) = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ con N elementos. La serie de ruido blanco con $N = 1000$, mostrada en la sección anterior, nos servirá como ejemplo para ilustrar el algoritmo (Figura 1.1). En primer lugar, integramos la serie de tiempo $X(i)$, con lo cual obtenemos la serie $I(i)$ dada por

$$I(i) = \sum_{j=1}^i X(j) \quad (1.5)$$

La serie de tiempo integrada correspondiente al ruido blanco es igual a ruido Browniano mostrado en la Figura 1.2. Posteriormente la serie integrada, $I(i)$, es dividida en cajas o ventanas de longitud n . En seguida, ajustamos una recta de mínimos cuadrados a los datos contenidos en cada una de las cajas. Dicha recta representa la tendencia de los datos dentro de las cajas. Una imagen de la serie de tiempo integrada (ruido Browniano), la cual ha sido dividida en diez ventanas ($n = 100$), junto con las respectivas rectas ajustadas, es mostrada en la Figura 1.3.

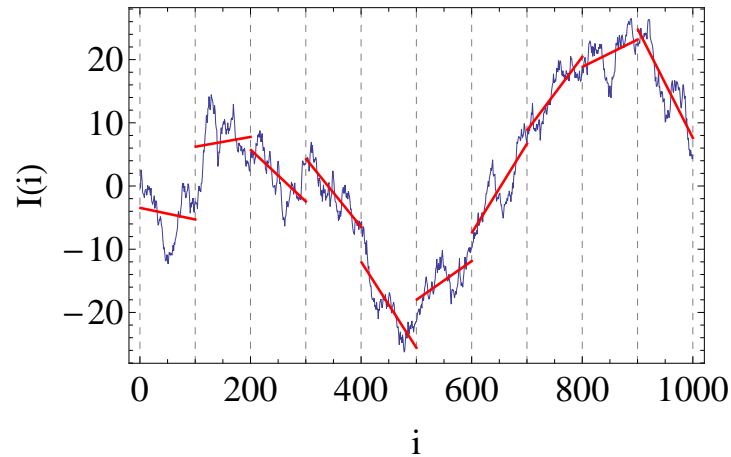


Figura 1.3: Serie de tiempo integrada (ruido Browniano). Las líneas punteadas verticales indican el tamaño de las cajas $n = 100$, en las cuales ha sido dividida la serie. Los segmentos de recta de color rojo corresponden al ajuste por mínimos cuadrados de los datos en cada caja y representan la tendencia de los mismos en cada ventana.

Denotamos a la coordenada y de los segmentos de recta por $y_n(i)$. A continuación destendenciamos a la serie de tiempo integrada $I(i)$, restando la tendencia local, $y_n(i)$, en cada una de las cajas. La serie obtenida al realizar este paso en la serie de ruido Browniano de nuestro ejemplo es mostrada en la Figura 1.4

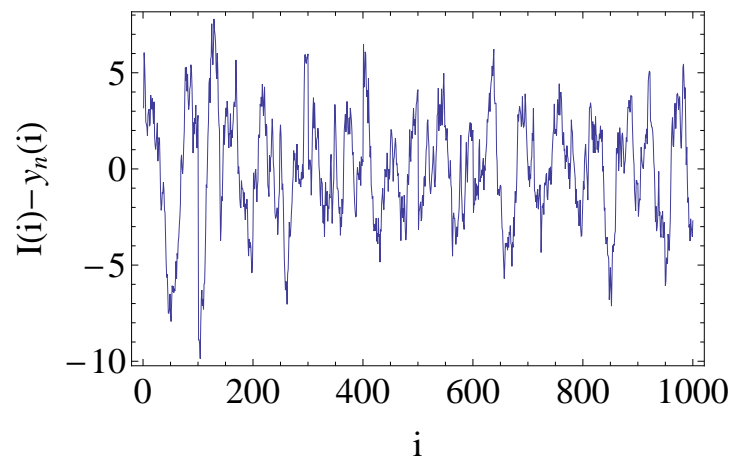


Figura 1.4: Serie de tiempo obtenida al restar la tendencia local, representada por los segmentos de recta de la Figura 1.3, en cada una de las cajas en que dividimos el ruido Browniano $I(i)$.

Ahora calculamos la fluctuación promedio para el tamaño de ventana n , $F(n)$, la cual está

dada por

$$F(n) \equiv \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [I(i) - y_n(i)]^2} \quad (1.6)$$

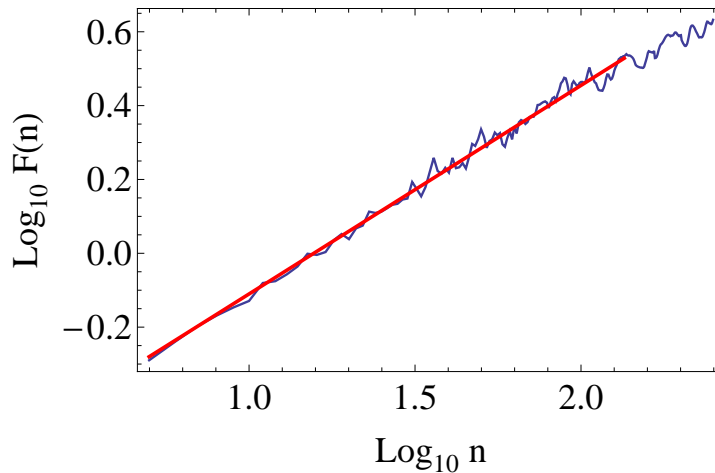


Figura 1.5: Gráfica log-log del tamaño de ventana n contra la fluctuación promedio $F(n)$. La pendiente de la recta ajustada, $\alpha = 0.54$, caracteriza a las fluctuaciones y corresponde a una serie de ruido blanco, para la cual teóricamente $\alpha = 0.5$.

Finalmente calculamos la fluctuación promedio para un rango de escalas de tiempo (tamaños de ventana). En general, $F(n)$ se incrementará con el tamaño de caja n . Una relación lineal en una gráfica de $\log F(n)$ contra $\log n$ indica la presencia de escalamiento de ley de potencias (fractal). La pendiente de tal relación lineal es igual al exponente de escalamiento α , el cual caracteriza a las fluctuaciones. En la Figura 1.5 se muestra la gráfica de $\log F(n)$ contra $\log n$ del ejemplo estudiado así como la recta ajustada correspondiente. El exponente α del DFA está relacionado con el exponente β del análisis de Fourier mediante la relación $\beta = 2\alpha - 1$ [28]. En la siguiente tabla se muestran algunos valores de α así como el tiempo de serie de tiempo al que corresponden.

El DFA que hemos descrito se conoce como DFA de primer orden puesto que ajusta una recta para extraer la tendencia de los datos. Sin embargo, en general, también es posible ajustar polinomios de orden más alto para extraer la tendencia en cada una de las ventanas en que hemos dividido la serie de tiempo integrada. En este caso se denomina DFA de orden mayor.

1.4. Singular Value Decomposition (SVD)

Cualquier matriz cuadrada simétrica \mathbf{X} , tiene una descomposición espectral de la forma

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}^T \quad (1.7)$$

donde $\mathbf{\Lambda}$ es una matriz cuadrada, diagonal y real, conteniendo los eigenvalores de \mathbf{X} , y \mathbf{U} es una matriz ortogonal, cuyas columnas son los eigenvectores de \mathbf{X} .

Sin embargo, la descomposición de la ecuación (1.7) no siempre es posible, por ejemplo, cuando la matriz \mathbf{X} no es cuadrada. En este caso, podemos emplear una descomposición más general denominada Singular Value Decomposition (SVD). En analogía con la descomposición espectral, la descomposición de valores singulares [30,31] de una matriz real \mathbf{X} de dimensiones $m \times n$ y rango r^4 , factoriza a la matriz \mathbf{X} como el producto de tres matrices simples, tal que

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \quad (1.8)$$

donde \mathbf{U} es una matriz ortogonal de $m \times m$, \mathbf{V}^T es la transpuesta de una matriz ortogonal \mathbf{V} de $n \times n$, y $\mathbf{\Sigma}$ es una matriz diagonal de $m \times n$. De la ecuación (1.8) se tiene para las matrices positivas semidefinidas, $\mathbf{X}\mathbf{X}^T$ y $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$, que

$$\begin{aligned} \mathbf{X}\mathbf{X}^T &= \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T\mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^T\mathbf{U}^T \\ &= \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{\Sigma}^T\mathbf{U}^T \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^T\mathbf{X} &= \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^T\mathbf{U}^T\mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \\ &= \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^T\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \end{aligned} \quad (1.10)$$

donde hemos usado la ortogonalidad de \mathbf{U} y \mathbf{V} . Las ecuaciones (1.9) y (1.10) muestran que las columnas de la matriz \mathbf{U} son los eigenvectores, $\hat{\mathbf{u}}_i$, de $\mathbf{X}\mathbf{X}^T$, para $i = 1, \dots, m$, mientras que las columnas de \mathbf{V} son los eigenvectores, $\hat{\mathbf{v}}_j$, de $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$, para $j = 1, \dots, n$,⁵ tal que

$$\hat{\mathbf{u}}_i = \begin{pmatrix} u_{i1} \\ u_{i2} \\ \vdots \\ u_{im} \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{u}}_i^T = (u_{i1}, u_{i2}, \dots, u_{im}) \quad (1.11)$$

⁴Si \mathbf{X} es una matriz de $m \times n$ entonces el espacio generado por las columnas de \mathbf{X} , y el espacio generado por las filas de \mathbf{X} tienen la misma dimensión, la cual es igual al número de columnas o filas de \mathbf{X} linealmente independientes. A este número común se le denomina rango de \mathbf{X} y es menor o igual al mínimo entre m y n .

⁵Note que solamente se tienen r eigenvectores ortonormales $\hat{\mathbf{u}}_i$, así que si $r < m$, habrán de adicionarse $m - r$ vectores ortonormales para completar la base y formar la matriz cuadrada \mathbf{U} . En el caso de la matriz \mathbf{V} , si $r < n$, el número de vectores ortonormales $\hat{\mathbf{v}}_j$ adicionales serán $n - r$. Estos vectores adicionales no afectan la descomposición puesto que los eigenvalores asociados con ellos son cero.

$$\hat{\mathbf{v}}_j = \begin{pmatrix} v_{j1} \\ v_{j2} \\ \vdots \\ v_{jn} \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{v}}_j^T = (v_{j1}, v_{j2}, \dots, v_{jn}) \quad (1.12)$$

siendo $\hat{\mathbf{u}}_i^T$ y $\hat{\mathbf{v}}_i^T$, los vectores fila correspondientes a $\hat{\mathbf{u}}_i$ y $\hat{\mathbf{v}}_i$, respectivamente. Por otra parte $\Sigma\Sigma^T$ y $\Sigma^T\Sigma$ son matrices cuadradas diagonales de dimensiones $m \times m$ y $n \times n$, respectivamente, las cuales contienen los eigenvalores λ_k , para $k = 1, \dots, r$, de $\mathbf{X}\mathbf{X}^T$ o $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$.

De este modo se tiene que Σ es una matriz diagonal de $m \times n$ conteniendo las raíces cuadradas de los eigenvalores λ_k , denominados *valores singulares* de \mathbf{X} , $\sigma_k = \sqrt{\lambda_k}$. Estos valores singulares se ordenan en forma descendente de acuerdo a su magnitud, es decir, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r$. Esto a su vez dicta la manera en que habrán de ordenarse los eigenvectores $\hat{\mathbf{u}}_i$ y $\hat{\mathbf{v}}_j$, dentro de las matrices \mathbf{U} y \mathbf{V} . Los eigenvectores $\hat{\mathbf{u}}_i$, se conocen como *vectores singulares izquierdos* de \mathbf{X} , mientras que los eigenvectores $\hat{\mathbf{v}}_j$, se denominan *vectores singulares derechos* de \mathbf{X} . De este modo, la ecuación (1.8), puede escribirse como

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{21} & \cdots & u_{m1} \\ u_{12} & u_{22} & \cdots & u_{m2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{1m} & u_{2m} & \cdots & u_{mm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \cdots & v_{1n} \\ v_{21} & v_{22} & \cdots & v_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n1} & v_{n2} & \cdots & v_{nn} \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

De acuerdo a lo visto hasta ahora, la ecuación (1.8) requiere calcular los eigenvalores y eigenvectores de dos matrices simétricas, $\mathbf{X}\mathbf{X}^T$ y $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$. Sin embargo, es posible realizar la descomposición de valores singulares calculando solamente una eigen-descomposición. Al reescribir la ecuación (1.8) como

$$\mathbf{U} = \mathbf{X}\mathbf{V}\Sigma^{-1} \quad (1.14)$$

donde Σ^{-1} es una matriz de $n \times m$ de la forma

$$\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

se ve que una vez que se han calculado los eigenvalores, σ_k , y los eigenvectores, $\hat{\mathbf{v}}_k$, de $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$, entonces es posible calcular a los eigenvectores $\hat{\mathbf{u}}_k$ a partir de ellos. Alternativamente, se puede escribir la ecuación (1.8) en la forma

$$\mathbf{V} = \mathbf{X}^T\mathbf{U}(\Sigma^{-1})^T \quad (1.16)$$

donde la matriz Σ^{-1} es la misma de la ecuación (1.15). De este modo es posible también obtener los vectores singulares derechos $\hat{\mathbf{v}}_k$ a partir de los vectores singulares izquierdos $\hat{\mathbf{u}}_k$. La forma vectorial de las ecuaciones matriciales (1.14) y (1.16) son, respectivamente

$$\hat{\mathbf{u}}_k = \frac{1}{\sigma_k} \mathbf{X} \hat{\mathbf{v}}_k \quad (1.17)$$

y

$$\hat{\mathbf{v}}_k = \frac{1}{\sigma_k} \mathbf{X}^T \hat{\mathbf{u}}_k \quad (1.18)$$

La descomposición de valores singulares, ecuación (1.8), también puede ser expresada como una suma de matrices de rango uno. Considere la matriz identidad, \mathbf{I} , escrita en términos de los vectores columna ortonormales $\hat{\mathbf{u}}_i$

$$\mathbf{I} = \sum_{k=1}^r \hat{\mathbf{u}}_k \hat{\mathbf{u}}_k^T \quad (1.19)$$

Ahora multipliquemos a la matriz identidad por \mathbf{X}

$$\begin{aligned} \mathbf{IX} &= \sum_{k=1}^r \hat{\mathbf{u}}_k \hat{\mathbf{u}}_k^T \mathbf{X} \\ &= \sum_{k=1}^r \hat{\mathbf{u}}_k (\mathbf{X}^T \hat{\mathbf{u}}_k)^T \end{aligned} \quad (1.20)$$

y aplicando la ecuación (1.18) tenemos

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= \sum_{k=1}^r \sigma_k \hat{\mathbf{u}}_k \hat{\mathbf{v}}_k^T \\ &= \sum_{k=1}^r \mathbf{X}_k \end{aligned} \quad (1.21)$$

donde hemos definido

$$\mathbf{X}_k = \sigma_k \hat{\mathbf{u}}_k \hat{\mathbf{v}}_k^T \quad (1.22)$$

Si todos los los eigenvalores λ_k tienen multiplicidad uno entonces la expansión de la ecuación (1.21) es única. Las matrices \mathbf{X}_k tienen rango uno. A la colección $(\sigma_k, \hat{\mathbf{u}}_k, \hat{\mathbf{v}}_k)$ se les conoce como eigentriplete de SVD. Note además que $-\hat{\mathbf{u}}_k$ ($-\hat{\mathbf{v}}_k$) también es un eigenvector de $\mathbf{X}\mathbf{X}^T$ ($\mathbf{X}^T\mathbf{X}$) correspondiente al eigenvalor λ_i . Entonces en la ecuación (1.21) podemos reemplazar cualquier par $(\hat{\mathbf{u}}_k, \hat{\mathbf{v}}_k)$ por $(-\hat{\mathbf{u}}_k, -\hat{\mathbf{v}}_k)$ sin que ello altere el resultado.

1.5. Singular Spectrum Analysis (SSA)

El Singular Spectrum Analysis (SSA) es una técnica, libre de modelo, de análisis de series de tiempo univariadas. El propósito general del SSA es descomponer una serie de tiempo en una suma de componentes (producidas por la serie misma) que pueden ser identificadas como tendencia, componentes oscilatorias y ruido [13, 14]. Una componente oscilatoria es una serie periódica o cuasi-periódica de amplitud constante o modulada, mientras que el ruido es cualquier serie aperiódica. Por otra parte, la tendencia de la serie es, aproximadamente, una componente de la serie que varía lentamente sin presentar oscilaciones. Así, una vez efectuada la descomposición anterior estamos en posibilidades de realizar tareas más específicas tales como la extracción de señal del ruido, extracción de componentes oscilatorias y el suavizamiento de la de serie de tiempo. Una importante característica del SSA es que puede ser usado para analizar series relativamente cortas, así como a series no estacionarias y, a diferencia de otras técnicas adaptadas a los datos tales como el Empirical Mode Decomposition (EMD) [32], también es posible aplicarlo a series de tiempo monótonas. El SSA ha llegado a ser una herramienta estándar en el análisis de series de tiempo climáticas [33] y geofísicas [34], pero también su uso se ha extendido a diferentes áreas tales como la medicina [35], la astronomía [36], la economía [37], entre otros.

Considere una serie de tiempo unidimensional, de valores reales y registrados a intervalos equidistantes en el tiempo, de longitud N , $Y(t) = (y_1, y_2, \dots, y_N)$. La versión del SSA que empleamos consta de tres pasos los cuales se describen a continuación.

Paso 1. Encajamiento. En este primer paso, la serie de tiempo univariada es mapeada a una matriz denominada *matriz de trayectoria*, \mathbf{X} . Sea L un número entero ($1 < L < N$), al cual denominaremos *longitud de ventana*. Construimos $K = N - L + 1$ vectores columna, \mathbf{x}_j , cada uno con L elementos, a partir de la serie de tiempo $Y(t)$ de la siguiente manera

$$\mathbf{x}_j = \begin{pmatrix} y_j \\ y_{j+1} \\ \vdots \\ y_{j+L-1} \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

para $j = 1, 2, \dots, K$. A estos vectores \mathbf{x}_j les llamaremos L -vectores retrasados. Al ordenar los L -vectores retrasados en un arreglo matricial, donde cada uno de ellos es una

columna, formamos la matriz de trayectoria \mathbf{X}

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= (\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_K) \\ &= \begin{pmatrix} y_1 & y_2 & \dots & y_K \\ y_2 & y_3 & \dots & y_{K+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_L & y_{L+1} & \dots & y_N \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.24)$$

La matriz de trayectoria \mathbf{X} también puede verse como una secuencia de vectores \mathbf{x}_j , es decir, como una serie de tiempo multivariada. La idea de emplear copias retrasadas de una única serie de tiempo es construir un espacio fase que aproxime la dinámica del sistema, y debido a esto a L también suele llamársele *dimensión de encajamiento*. Note que la matriz transpuesta, \mathbf{X}^T , es la matriz de trayectoria de la misma serie pero con una longitud de ventana igual a K . Además, de la ecuación (1.24) vemos que \mathbf{X} es una matriz de Hankel, es decir, sus elementos de matriz, x_{ij} , son todos iguales a lo largo de la diagonal definida por $i + j = c$, donde c es una constante.

La elección de la longitud de ventana L , depende de las propiedades de la serie a estudiar y el propósito del análisis, aunque en general, debe de ser lo suficientemente grande para incorporar una parte esencial del comportamiento de la serie. En aquellos casos donde se busca extraer una oscilación cuya periodicidad es conocida se sugiere un elegir una longitud de ventana cuyo tamaño sea igual a un múltiplo de dicho período.

Paso 2. SVD. Expresamos a la matriz de trayectoria \mathbf{X} como una suma de matrices de rango uno (ecuación 1.21). Para lograr lo anterior, realizamos la descomposición de valores singulares de \mathbf{X} , tal como se detallo en la sección anterior (véase Sección 1.4).

Paso 3. Reconstrucción. En este último paso mapeamos cada una de las matrices \mathbf{X}_k a una serie de tiempo $g_k(t)$, denominada *componente reconstruida*, de longitud igual a la de la serie Y .

Consideremos una matriz \mathbf{X}_k de $L \times K$ donde $K < L$ y cuyos elementos denotamos como x_{ij}^k . La manera en que obtenemos una serie $g_k(t)$ a partir de \mathbf{X}_k es mediante un promedio sobre sus elementos diagonales (Hankelización) de la siguiente forma

$$g_k(n) = \begin{cases} \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n x_{m,n-m+1}^k & \text{para } 1 \leq n \leq L-1 \\ \frac{1}{L} \sum_{m=1}^L x_{m,n-m+1}^k & \text{para } L \leq n \leq K \\ \frac{1}{N-n+1} \sum_{m=n-K+1}^{N-K+1} x_{m,n-m+1}^k & \text{para } K+1 \leq n \leq N \end{cases} \quad (1.25)$$

En el caso en que $L > K$ simplemente invertiremos los índices i y j en x_{ij}^k . La ecuación (1.25) realiza un promedio de los elementos de matriz x_{ij}^k localizados a lo largo de las N diagonales definidas por $i + j = n + 1$. El promedio se calcula sobre tres diferentes intervalos debido a que el número de elementos en cada diagonal es variable. Para $1 \leq n \leq L - 1$ comenzamos con un elemento hasta llegar a $L - 1$ elementos en incrementos de una unidad. Para $L \leq n \leq K$ el número de elementos se mantiene constante y es igual a L , mientras que para $K + 1 \leq n \leq N$ el número de elementos decrece hasta llegar a uno.

Al sumar todas las componentes reconstruidas recuperamos completamente a la serie Y . De esta manera, el SSA descompone la serie de tiempo Y en una suma de series

$$Y(t) = \sum_{k=1}^r g_k(t) \quad (1.26)$$

1.5.1. Extracción de tendencias y oscilaciones con SSA

Actualmente, no existe una definición universal de lo que es la tendencia en una serie de tiempo. En el contexto del SSA la tendencia sería una componente aditiva de la serie la cual es no estacionaria y varía lentamente durante el período de tiempo en el cual esta siendo observada. Una de las consecuencias de la definición anterior es que la solución al problema de identificación de tendencia o extracción de tendencia no sería única puesto que, dependiendo del grado de detalle o resolución que deseemos, podríamos obtener diferentes tendencias. Por otra parte, para series de tiempo finitas, siempre existe el problema de que una componente armónica de baja frecuencia es prácticamente indistinguible de una tendencia.

Para ilustrar las capacidades del SSA en cuanto a extracción de tendencia se refiere, estudiaremos su aplicación a la serie de tiempo de anomalías de temperatura superficial global anual, las cuales son las desviaciones (promediadas anualmente) de la temperatura media de la superficie terrestre y marina durante el período 1961-1990 [38]. Esta serie de tiempo es compilada conjuntamente por la Climate Research Unit, University of East Anglia, Norwich, U.K. y el Hadley Centre of the U.K. Meteorological Office. Los datos están disponibles en internet en la dirección <http://www.cru.uea.ac.uk/cru/data/temperature/>. La gráfica de la serie de tiempo se muestra en la Figura 1.6., la cual muestra que la serie de anomalías de temperatura tiene una tendencia general creciente. Sin embargo, siendo más minuciosos, podríamos dividir esta tendencia general en tres partes; la primera abarcando entre 1850 y 1910, la segunda entre 1910 y 1970 y la tercera de 1970 a 2012.

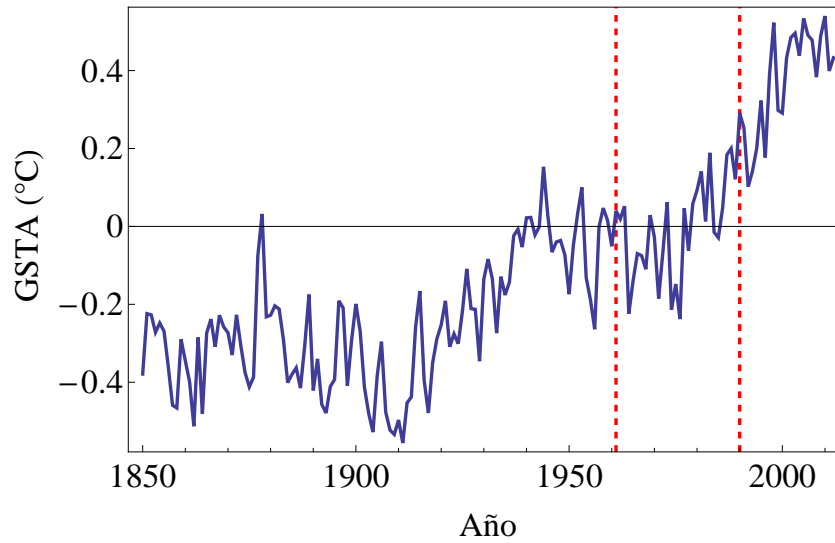


Figura 1.6: Serie de tiempo de anomalías de temperatura superficial global anual (GSTA) registradas desde 1850 a 2012. Tales anomalías corresponden con las desviaciones (promediadas anualmente) de la temperatura media de la superficie terrestre y marina durante el período 1961-1990 (período delimitado por las líneas punteadas rojas).

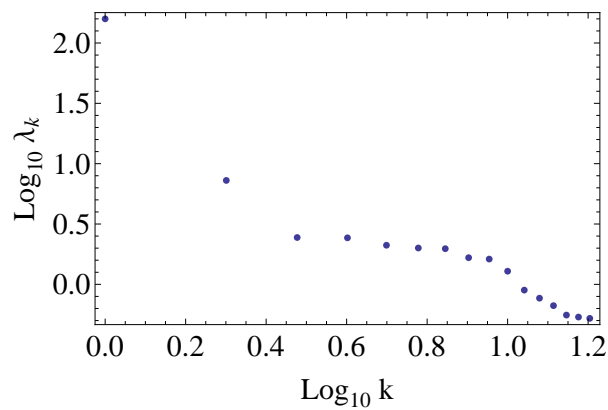


Figura 1.7: Diagrama de varianzas parciales, λ_k , en escala log-log (scree diagram) de la serie de anomalías de temperatura para $L = 10\%$ del tamaño de la serie. Como podemos observar λ_1 y λ_2 se apartan notablemente del resto sugiriendo que ellas son las responsables de la mayor parte de la varianza de la serie, y por lo tanto, que las correspondientes componentes reconstruidas constituyen la tendencia de la serie. Sin embargo, para lograr una mejor distinción entre componentes de tendencia y componentes de fluctuación, es necesario analizar el comportamiento de las respectivas componentes reconstruidas. Algunas de ellas son mostradas en la Figura 1.9.

A continuación mostraremos las capacidades del SSA en la extracción de tendencias y componentes oscilatorias. Las Figuras 1.7 y 1.8 muestran la gráfica de las varianzas parciales, λ_k , en escala log-log, conocido como *scree diagram*, obtenido al aplicar el SSA a la serie de anomalías de temperatura con una longitud de ventana $L = 10\%$ y $L = 50\%$ del tamaño de la serie, respectivamente.

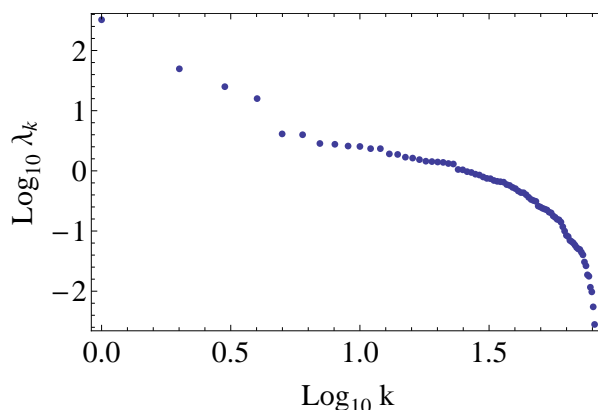


Figura 1.8: Diagrama de varianzas parciales, λ_k , en escala log-log (*scree diagram*) de la serie de anomalías de temperatura para $L = 50\%$ del tamaño de la serie. Como podemos observar $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ y λ_4 se apartan notablemente del resto sugiriendo que ellas son las responsables de la mayor parte de la varianza de la serie, y por lo tanto que las correspondientes componentes reconstruidas constituyen la tendencia de la serie. Para lograr una mejor separación entre las componentes de tendencia y fluctuación, es necesario analizar el comportamiento de las respectivas componentes reconstruidas. Algunas de ellas son mostradas en la Figura 1.12.

Ciertas características de las varianzas parciales λ_k , obtenidos al aplicar el SSA, pueden ayudarnos a visualizar cuáles componentes reconstruidas g_k corresponden con la tendencia de la serie. De la Figura 1.7 podemos observar que las primeras dos varianzas parciales, λ_1 y λ_2 , se destacan del resto. Las varianzas parciales más grandes están asociadas con las direcciones en las cuales la varianza de la serie es mayor, por lo tanto, esperaríamos que las dos primeras componentes reconstruidas, g_1 y g_2 , correspondieran con la tendencia de la serie. Sin embargo, una inspección de las primeras cuatro componentes reconstruidas g_1-g_4 de la Figura 1.9, nos muestra que la componente reconstruida número uno, la cual oscila muy lentamente, es la componente dominante, mientras que el resto oscilan mucho más rápido, sugiriendo que únicamente la primer componente reconstruida, g_1 , forma parte de la tendencia. La tendencia obtenida de esta manera, así como la obtenida al sumar las primeras dos componentes g_1 y g_2 , es mostrada en la Figura 1.10. En este último caso lo que se observa es una oscilación montada sobre la tendencia general conseguida con g_1 .

La serie de fluctuaciones obtenida al quitar la tendencia conformada únicamente por la primer componente reconstruida, g_1 , de la serie GSTA, es mostrada en la Figura 1.11. Como podemos ver las fluctuaciones corresponden a una serie de tiempo estacionaria, es decir, no se observa tendencia alguna.

A continuación mostraremos que las fluctuaciones obtenidas al eliminar la tendencia de una serie de tiempo con el SSA, son invariantes con respecto a la longitud de ventana o dimensión de encajamiento, L , elegida.

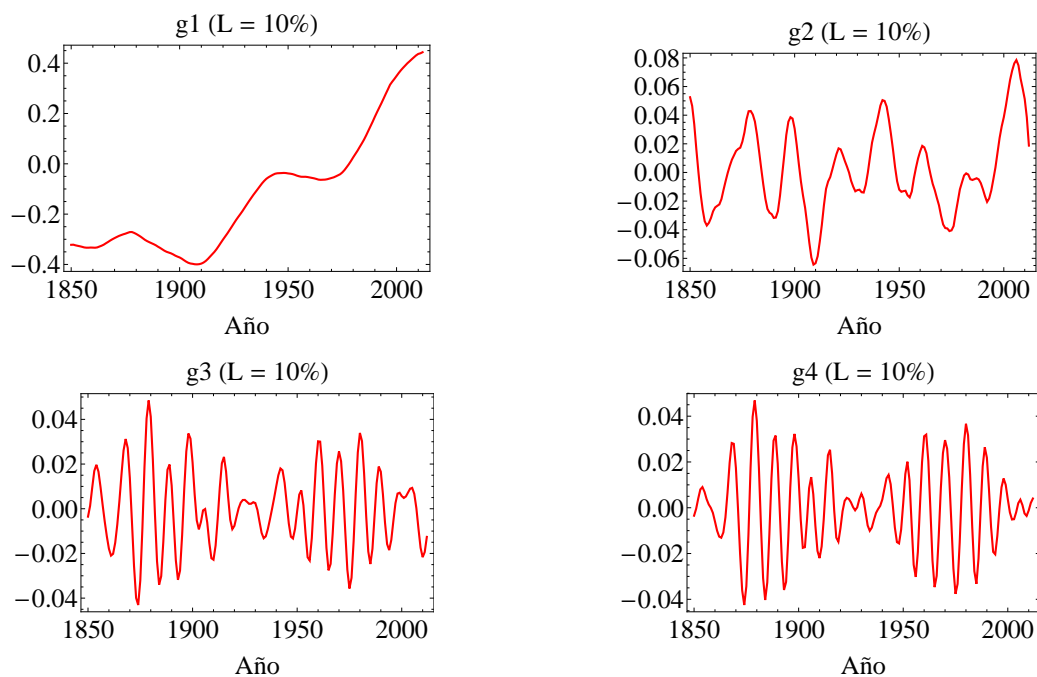


Figura 1.9: Gráfica de las primeras cuatro componentes reconstruidas obtenidas al aplicar el SSA a la serie de tiempo GSTA para $L = 10\%$ del tamaño de la serie. Podemos ver que la primer componente reconstruida, g_1 , es la componente dominante y corresponde con la oscilación más lenta, lo cual, junto con el diagrama de varianzas parciales (Figura 1.7), sugiere que únicamente esta componente constituye la tendencia de la serie como puede apreciarse en la Figura 1.10.

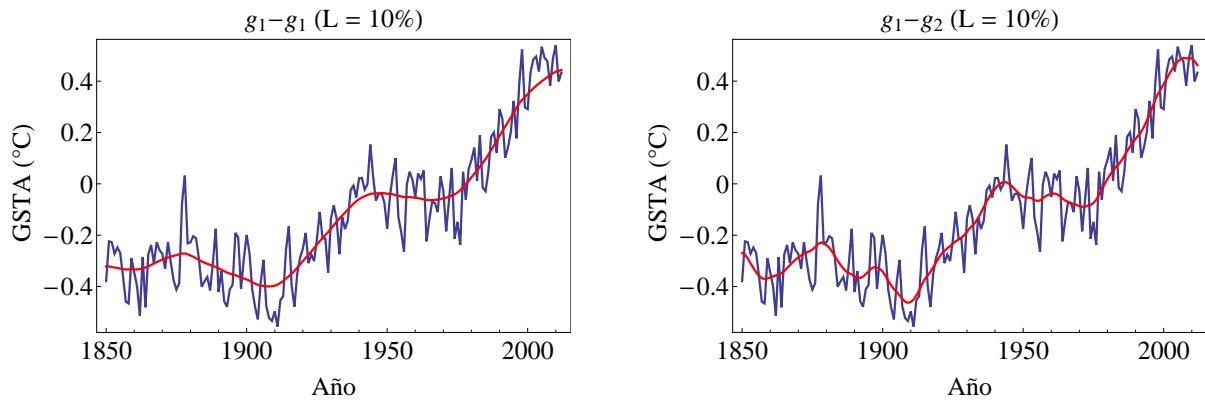


Figura 1.10: Gráfica de la serie de tiempo GSTA junto con diferentes ajustes para la tendencia. En la imagen izquierda se muestra la tendencia obtenida al considerar únicamente a la primer componente reconstruida, g_1 , a ser parte de la tendencia. En la derecha se muestra la tendencia resultado de considerar a las primeras dos componentes reconstruidas g_1 y g_2 como parte de la tendencia.

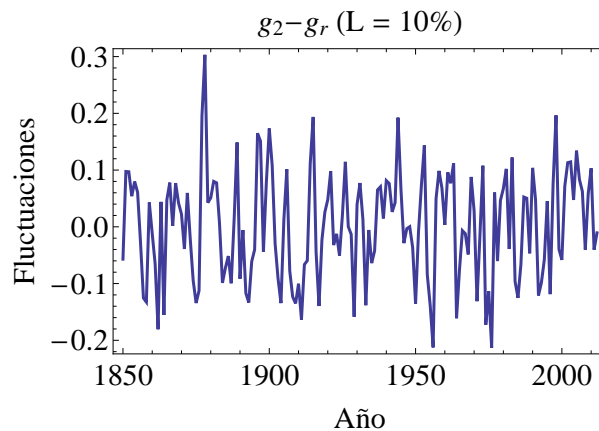


Figura 1.11: Gráfica de las fluctuaciones de la serie de tiempo GSTA, obtenidas al sustraer la tendencia constituida por la primer componente reconstruida g_1 .

Como pudimos notar en este primer ejemplo, el haber escogido un valor relativamente pequeño de L , dio por resultado que únicamente la primer componente reconstruida, g_1 , constituyera la tendencia de la serie. Sin embargo, mostraremos que si bien, para valores más grandes de L el número de componentes a ser consideradas para formar parte de la tendencia aumenta, las fluctuaciones obtenidas son invariantes ante los valores de L escogidos, y que siempre al analizar el scree diagram, así como las componentes reconstruidas, obtendremos la información y guía necesaria para lograr realizar una separación apropiada de tendencia y fluctuaciones en la serie de tiempo.

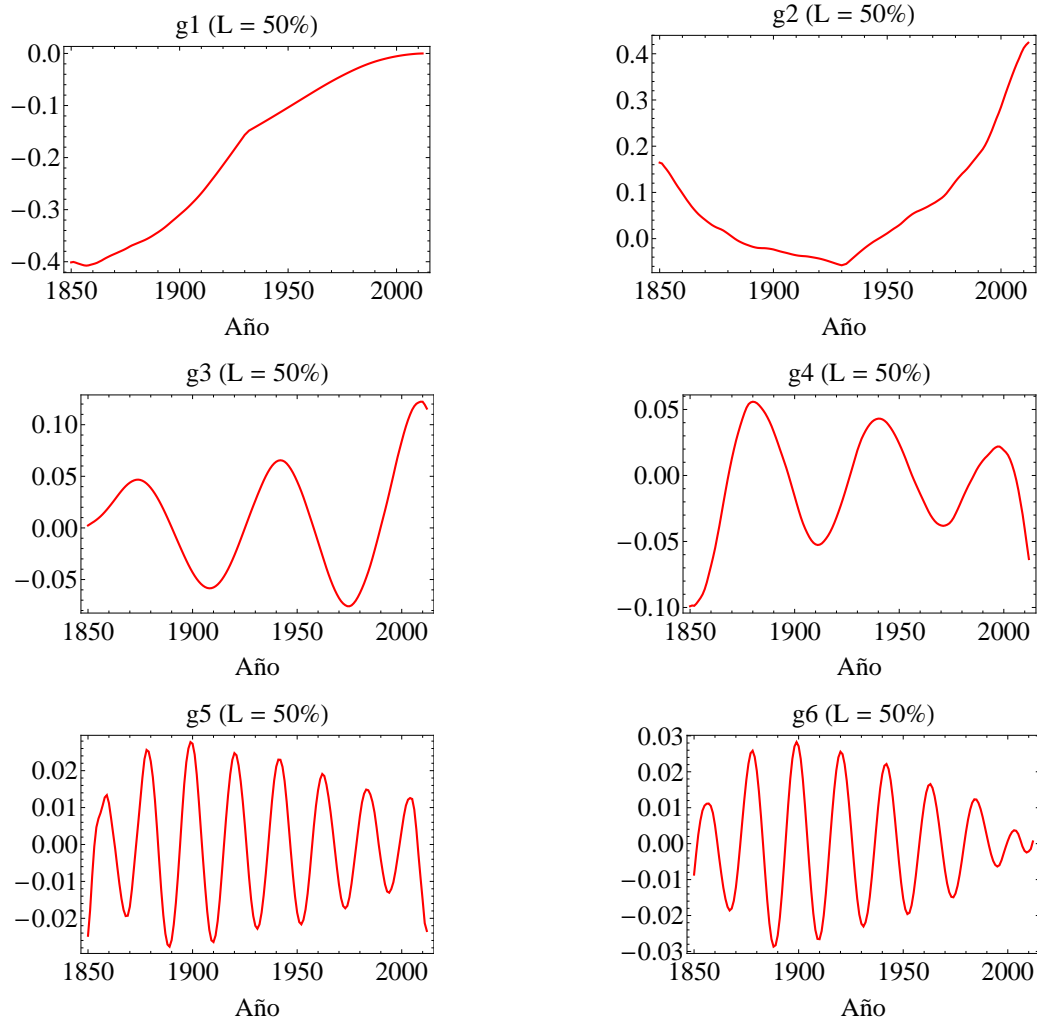


Figura 1.12: Gráfica de las primeras seis componentes reconstruidas obtenidas al aplicar el SSA a la serie de tiempo GSTA para $L = 50\%$ del tamaño de la serie. Podemos ver que las primeras dos componentes reconstruidas, g_1 y g_2 , son las componentes dominantes y no oscilantes, mientras que las componentes reconstruidas g_3 y g_4 son las componentes que oscilan más lentamente, con un período de 60 años. De acuerdo con el diagrama de varianzas parciales de la Figura 1.8 estas cuatro componentes constituyen la tendencia de la serie. Las componentes g_5 y g_6 corresponden a una oscilación con un período aproximado de 20 años.

En la Figura 1.12 se muestran las primeras seis componentes reconstruidas al aplicar el SSA a la serie GSTA cuando $L = 50\%$ del tamaño de la serie. En este caso podemos apreciar que las primeras dos componentes reconstruidas, g_1 y g_2 , corresponden a componentes no oscilatorias,

mientras que las componentes g_3 y g_4 , constituyen las componentes oscilatorias de frecuencia más baja, con un período de oscilación de aproximadamente 60 años.

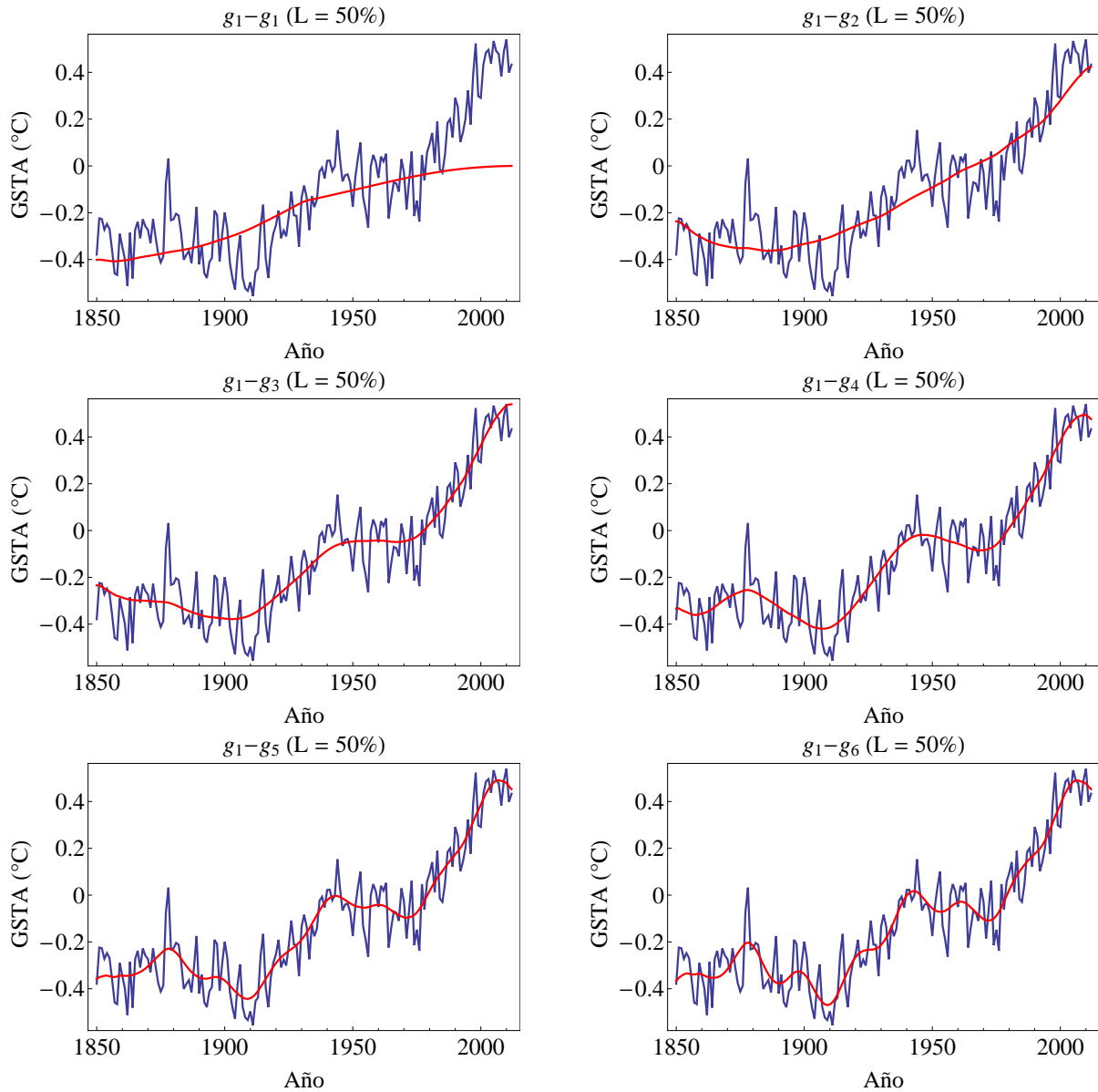


Figura 1.13: Gráfica de la serie de tiempo GSTA junto con diferentes ajustes para la tendencia. La tendencia que mejor se ajusta a los datos es la constituida por la suma de las componentes reconstruidas g_1-g_4 . Si consideramos menos componentes obtenemos tendencias más general con diferentes grados de resolución, y si consideramos más componentes se observan oscilaciones montadas sobre la tendencia obtenida con las componentes g_1-g_4 .

Las componentes reconstruidas g_5 y g_6 , corresponden con oscilaciones cuyo período aproximado es de 20 años. De acuerdo al diagrama de varianzas parciales de la Figura 1.8, las cuatro primeras componentes reconstruidas, g_1-g_4 , corresponden a la tendencia de la serie, sin embargo, si consideramos menos componentes para ser parte de la tendencia lo que obtenemos son tendencias más generales de diferente resolución, mientras que al considerar más componentes lo que se observa son oscilaciones montadas sobre las tendencias obtenidas con las componentes g_1-g_4 , como podemos apreciar en la Figura 1.13. En la Figura 1.14 se muestran las series de fluctuaciones resultado de eliminar de la serie GSTA tendencias de diferente resolución, constituidas por g_1 , g_1-g_2 , g_1-g_3 y g_1-g_4 .

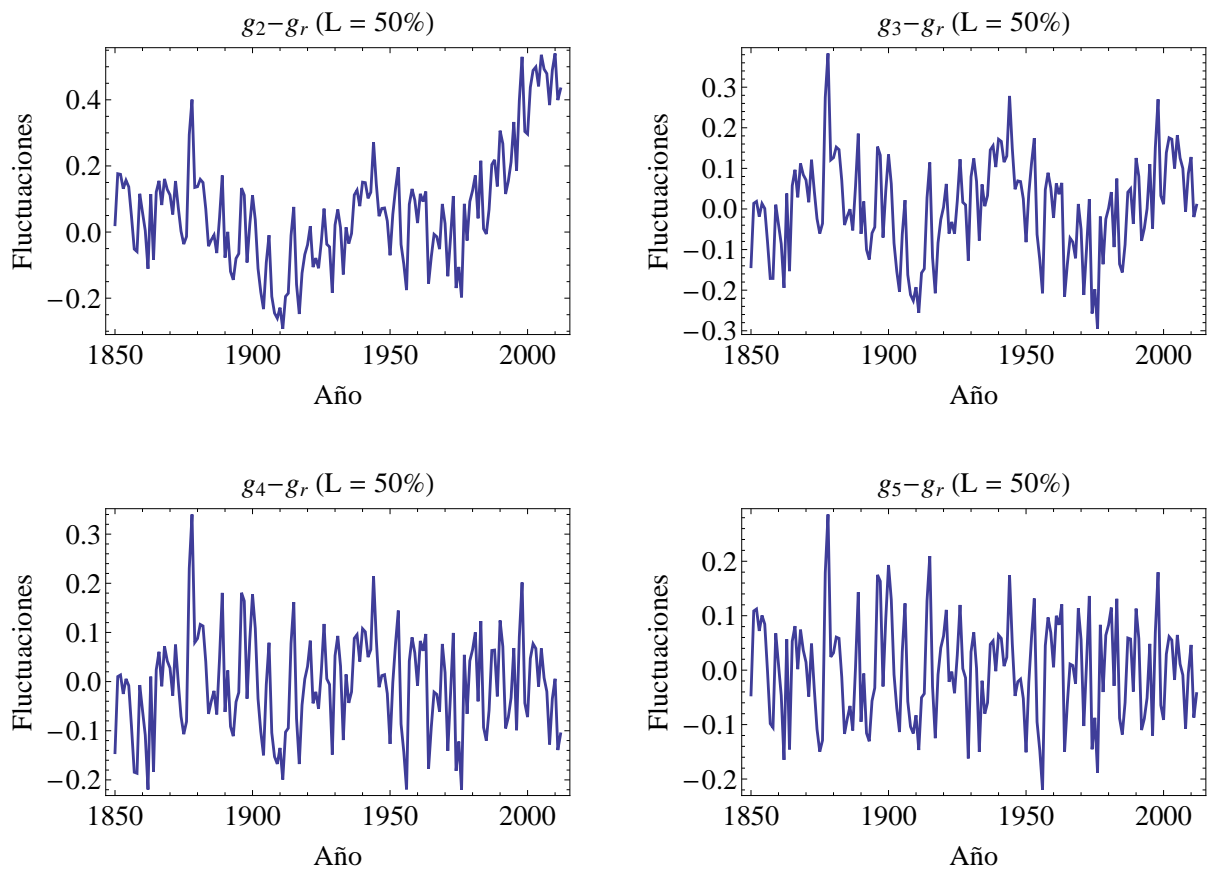


Figura 1.14: Gráfica de las fluctuaciones de la serie de tiempo GSTA, obtenidas al quitar tendencias de diferente resolución, para $L = 50\%$ de la longitud de la serie. Note que la imagen de la esquina inferior derecha muestra fluctuaciones estadísticamente similares a aquellas mostradas en la Figura 1.11

A diferencia de los resultados obtenidos al tomar $L = 10\%$ de la longitud de la serie de tiempo, en este caso el número de componentes reconstruidas a ser parte de la tendencia fue

mayor, debido a que la longitud de ventana fue más grande. Esto se debe a que en el caso de $L = 10\%$, la “resolución” con la cual la serie es analizada, es mayor que en el caso de $L = 50\%$, logrando que las componentes reconstruidas se ajusten mejor a los datos. Note la semejanza entre la tendencia obtenida al considerar a g_1 como tendencia de la serie GSTA cuando $L = 10\%$, y aquella obtenida al considerar g_1-g_4 , en el caso de $L = 50\%$. Asimismo, la serie de fluctuaciones de la Figura 1.11 cuando $L = 10\%$, es estadísticamente similar a las fluctuaciones mostradas en la imagen inferior derecha de la Figura 1.14 para $L = 50\%$.

Resultados de la tendencia ajustada a la serie GSTA, así como de las correspondientes fluctuaciones obtenidas, para valores de $L = 20, 30$ y 40 por ciento de la longitud de la serie, son mostrados en la Figura 1.15. En el caso de $L = 20\%$ y $L = 30\%$ las componentes reconstruidas a ser incluidas en la tendencia fueron las primeras dos, g_1-g_2 , mientras que en el caso de $L = 40\%$, las primeras tres componentes, g_1-g_3 , forman la tendencia de la serie. La manera en como se determinó el número de componentes a formar parte de la tendencia fue el mismo se utilizó en los dos ejemplos vistos hasta ahora para $L = 10\%$ y $L = 50\%$, es decir, en base a los correspondientes diagramas de varianzas parciales y el análisis de las componentes reconstruidas (no mostrados aquí).

En estos tres casos, $L = 20\%$, 30% y 40% , las correspondientes fluctuaciones obtenidas son estadísticamente similares entre ellas, como puede verse en la Figura 1.15, y a las fluctuaciones obtenidas anteriormente para $L = 10\%$ y $L = 50\%$, al considerar a g_1 y g_1-g_4 como parte de la tendencia, respectivamente.

Finalmente en la Figura 1.16 es mostrado que debido a la simetría de la matriz de trayectoria, \mathbf{X} , los resultados obtenidos al considerar valores de $L \geq 50\%$ de la longitud de la serie son equivalentes a los obtenidos para valores de $L \leq 50\%$. Así, los resultados obtenidos para $L = 10\%$ son similares a los obtenidos para $L = 90\%$, los de $L = 20\%$ son similares a los de $L = 80\%$, y así sucesivamente. Esta es la razón por la cual usualmente el valor de L se restringe a $L \leq 50\%$. En particular, en cada caso es mostrada la serie GSTA junto con la primer componente reconstruida, g_1 . De nuevo observamos que mientras más grande sea el valor de L ($L \leq 50\%$), mayor será el número de componentes reconstruidas que formarán parte de la tendencia.

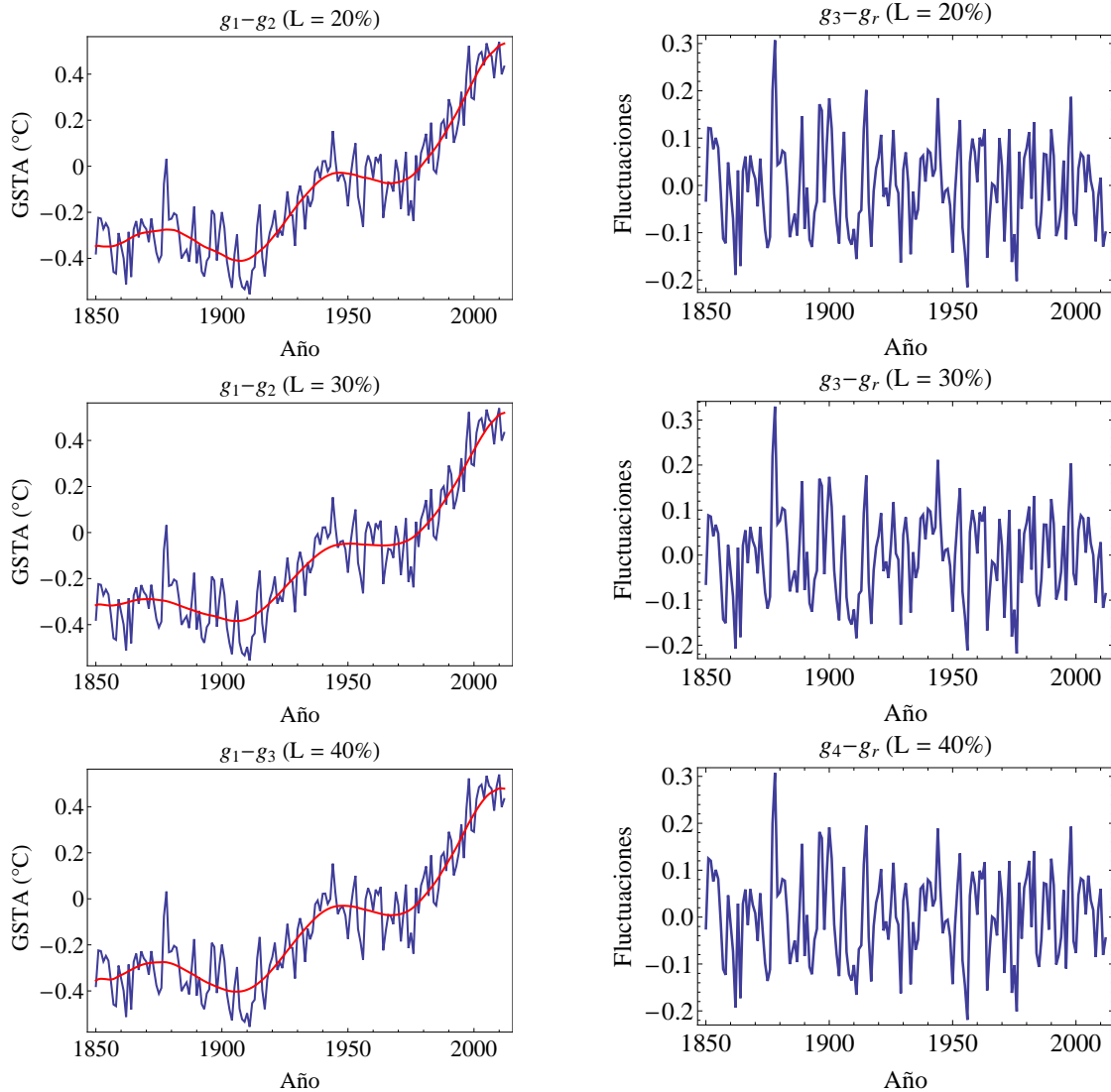


Figura 1.15: Gráfica de las tendencias ajustadas a la serie GSTA así como de las correspondientes fluctuaciones para $L = 20, 30$ y 40 por ciento de la longitud de la serie. Note la semejanza entre las tendencias y fluctuaciones para los diferentes valores de L mostrados aquí y a los resultados obtenidos para los ejemplos vistos anteriormente para $L = 10\%$ y $L = 50\%$.

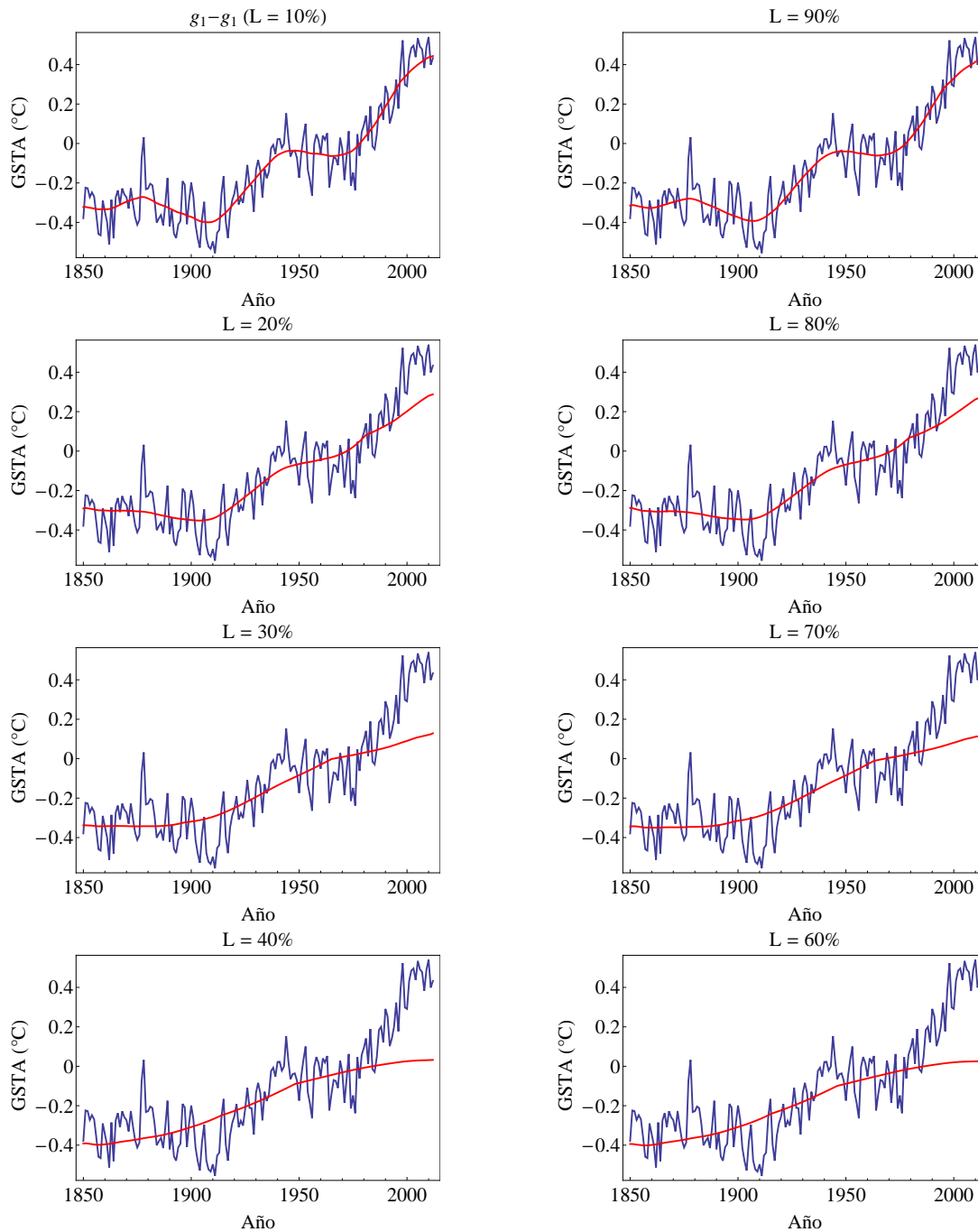


Figura 1.16: Gráfica de la serie de tiempo GSTA así como de la primer componente reconstruida, g_1 , para diferentes valores de la dimensión de encajamiento L . Note que los resultados obtenidos para $L \geq 50\%$ del tamaño de la serie son equivalentes a su contraparte para $L \leq 50\%$ debido a la simetría de la matriz de trayectoria \mathbf{X} . Igualmente podemos apreciar de nuevo que mientras el valor de L es más grande ($L \leq 50\%$), mayor es el número de componentes reconstruidas a ser consideradas como parte de la tendencia.

Capítulo 2

Teoría de matrices aleatorias (RMT)

La teoría de matrices aleatorias (RMT por sus siglas en inglés) nos permite describir las propiedades estadísticas de las fluctuaciones en los niveles de energía de sistemas cuánticos. Su comienzo tuvo lugar en la década de los 50's cuando Eugene Wigner, al estudiar los niveles de energía de núcleos altamente excitados, encontró que dichos niveles eran estadísticamente similares a los eigenvalores de una matriz Hermítica aleatoria. Desarrollos posteriores de la teoría fueron llevados a cabo principalmente por F. J. Dyson, M. L. Mehta, C. E. Porter y N. Rosenzweig. Una compilación de los artículos más importantes sobre RMT de esta época fue llevada a cabo por Porter [39].

Los modelos nucleares nos permiten describir a la mayoría de los estados en la región de baja energía del espectro de excitación de un núcleo debido a que la densidad de niveles es pequeña. Sin embargo, debido al rápido incremento de la densidad de niveles con la energía de excitación, lograr una descripción detallada de los niveles de energía individuales a energías más altas ($E \sim 6\text{MeV}$) se vuelve cada vez más difícil. Esta situación motivó el desarrollo de una teoría estadística de los niveles de energía; la teoría de matrices aleatorias. En palabras de Dyson: “La teoría estadística no predecirá la secuencia detallada de niveles en algún núcleo, pero describirá la apariencia general y el grado de irregularidad en la estructura de niveles que se espera ocurra en algún núcleo, la cual es demasiado complicada para ser entendida en detalle ... Imaginamos un núcleo complejo como una *caja negra* en la cual un gran número de partículas están interactuando de acuerdo a leyes desconocidas. El problema es entonces definir en una forma matemáticamente precisa un ensamble de sistemas en el cual todas las leyes de interacción posibles son igualmente probables”. Puesto que un sistema cuántico puede ser representado por su correspondiente matriz Hamiltoniana, el ensamble de estados se traducirá en un ensamble de matrices. Como veremos más adelante, para la construcción de dichas matrices únicamente se tomarán en cuenta las simetrías del sistema tales como la invariancia bajo inversión temporal o invariancia rotacional. Fuera de la restricción anterior las entradas de las matrices serán variables aleatorias con una cierta distribución de probabilidad, de ahí el

nombre de matrices aleatorias. Diagonalizando estas matrices obtenemos los correspondientes espectros de energía.

Si bien, en un principio RMT fue concebida para modelar sistemas con muchos grados de libertad como los núcleos atómicos, investigaciones posteriores demostraron también su utilidad en la descripción de sistemas con pocos grados de libertad. Una notable universalidad es encontrada en las propiedades de fluctuación de los niveles de energía de una amplia variedad de sistemas tales como núcleos, átomos, moléculas, sistemas caóticos cuánticos, sistemas desordenados e incluso cromodinámica cuántica on the lattice. RMT ha llegado a ser además una herramienta muy importante en el estudio de las conexiones entre la física clásica y la física cuántica. En este sentido, durante los últimos 35 años se han llevado a cabo numerosas investigaciones con la finalidad de encontrar diferencias cualitativas entre sistemas cuánticos cuyas contrapartes clásicas son regulares y aquellos cuyas contrapartes clásicas son caóticas. En 1977 Berry y Tabor [40] propusieron que los espectros de sistemas cuánticos cuyos análogos clásicos son integrables deberían exhibir propiedades de correlación del tipo Poisson. Por otra parte, en 1984 resultados empíricos llevaron a Bohigas, Giannoni y Schmit [1] conjeturar que los espectros de sistemas cuánticos con contraparte clásica caótica exhiben propiedades de correlación modeladas por los ensambles Gaussianos clásicos de RMT. El estudio de estos sistemas es lo que se conoce como caos cuántico. Recientemente RMT ha encontrado nuevas aplicaciones en muchos campos, tales como en el estudio de eigenespectros de matrices de adyacencia de redes [41–43], y eigenespectros de matrices de correlación empíricas en finanzas [44], el clima [45], y electro y magnetoencefalografía [46].

En RMT estamos interesados en estudiar las propiedades de fluctuación de los espectros cuánticos que son determinadas por las simetrías del sistema, denominadas propiedades locales, las cuales son universales. Las propiedades de fluctuación que no son determinadas por las simetrías del sistema se conocen como propiedades globales y a diferencia de las propiedades locales, no son universales. Un ejemplo de propiedad local es la distribución de los espaciamientos entre niveles vecinos, mientras que un ejemplo de propiedad global es la densidad de niveles $\rho(E)$. A fin de estudiar las propiedades locales es necesario deshacernos de las características no universales mediante un proceso denominado unfolding. El unfolding además nos permite mapear el espectro original a uno nuevo tal que tenga un espaciamiento entre niveles promedio uniforme igual a uno. Una vez llevado a cabo el unfolding podemos calcular diversas medidas de fluctuación espectral tales como la varianza del número de niveles Σ^2 , la distribución de espaciamientos del vecino más cercano (NNSD), la estadística Δ_3 , entre otras, las cuales, como veremos, nos proporcionarán información acerca de las correlaciones entre los niveles de energía o sus espaciamientos, lo que su vez nos dará información acerca de las características generales del espectro. Para dar validez estadística, todas estas medidas son obtenidas realizando un promedio sobre el ensamble de matrices aleatorias. Los resultados así obtenidos concuerdan con los obtenidos mediante un promedio espectral en el límite en que el

número de niveles tiende a infinito. Esto es referido como ergodicidad en RMT.

2.1. Ensamblés Gaussianos clásicos

Los ensambles Gaussianos clásicos de la teoría de matrices aleatorias modelan sistemas cuánticos que poseen simetrías particulares. Estas simetrías imponen constricciones adicionales sobre la estructura de la matriz Hermítica H representando el Hamiltoniano del sistema. En la mecánica cuántica de Schrödinger estándar existen tres posibles clases de simetría las cuales son etiquetadas por el índice de Dyson β , el cual indica la dimensión del álgebra subyacente sobre la cual la matriz H es construida. Así, para denotar si los elementos de una matriz son números reales (\mathbb{R}), complejos (\mathbb{C}) o cuaterniónicos (\mathbb{H}), se emplea la notación $\beta = 1, 2$, o 4 , respectivamente. La matriz Hamiltoniana de un sistema cuántico es simétrica real ($\beta = 1$) si el sistema es invariante bajo inversión temporal y i) sin importar cual sea su comportamiento bajo rotaciones su momento angular total es entero (espín entero), ii) el sistema además es rotacionalmente invariante y tiene momento angular total semientero (espín semientero). Por otra parte, si un sistema cuántico es invariante bajo inversión temporal pero no ante rotaciones y tiene momento angular total semientero, entonces sus niveles de energía son doblemente degenerados y su matriz Hamiltoniana es una matriz cuaterniónica real ($\beta = 4$). Si el sistema no es invariante bajo inversión temporal, independientemente de si es invariante o no ante rotaciones, su Hamiltoniano es representado por una matriz Hermítica compleja ($\beta = 2$).

En base a lo anterior definimos tres clases de ensambles de matrices aleatorias, denominados ensambles Gaussianos clásicos: el ensamble ortogonal Gaussiano (GOE) definido en el espacio de matrices simétricas reales, el ensamble unitario Gaussiano (GUE) definido en el espacio de matrices Hermíticas y el ensamble simpléctico Gaussiano (GSE) definido en el espacio de matrices Hermíticas auto duales o cuaterniónicas reales. Además de las tres clases de simetría, las propiedades que definen a estos ensambles Gaussianos clásico de matrices aleatorias H son:

- a) Bajo cualquier transformación $H \rightarrow A^{-1}HA$ la probabilidad $P(H)d[H]$ de que un sistema de alguno de los ensambles Gaussianos clásicos pertenecerá al elemento de volumen dH debe ser invariante. En el caso de que H sea una matriz simétrica real la probabilidad $P(H)d[H]$ es invariante ante transformaciones ortogonales, es decir, A es una matriz del grupo ortogonal $O(N)$. Es por esto que al ensamble de matrices simétricas reales se le denomina ensamble ortogonal Gaussiano (GOE). Cuando H es una matriz Hermítica la probabilidad $P(H)d[H]$ es invariante ante transformaciones unitarias, es decir, A es una matriz del grupo unitario $U(N)$, y por esta razón al ensamble de matrices Hermíticas se le llama ensamble unitario Gaussiano (GUE). Si H es una matriz cuaterniónica real entonces la probabilidad $P(H)d[H]$ es invariante bajo cualquier transformación

$H \rightarrow A^{-1}HA$ donde A sea una matriz del grupo simpléctico unitario $USp(2N)$. De este modo al ensamble de matrices cuaterniónicas reales se le conoce como ensamble simpléctico Gaussiano (GSE), y por consiguiente las tres clases de simetría son referidas como ortogonal, unitaria y simpléctica.

- b) Los elementos de matriz no relacionados por las simetrías de la matriz son estadísticamente independientes, es decir, su función de densidad de probabilidad conjunta es igual al producto de las funciones de densidad de probabilidad individuales.

Las matrices H que conforman cada uno de los ensambles anteriores se dice que son aleatorias en el sentido de que sus elementos de matriz independientes son asumidos a ser variables aleatorias, es decir, son obtenidos aleatoriamente de la distribución de probabilidad $P(H)$. Tal distribución es determinada por las dos condiciones a) y b) mencionadas anteriormente. Así, para asegurar que la distribución de probabilidad $P(H)$ de cada uno de los ensambles Gaussianos clásicos sea invariante bajo la transformación apropiada, demandamos que $P(H)$ dependa solamente de las trazas de las potencias de H . Esto junto con el requisito de que los elementos de matriz sean estadísticamente independientes (al grado permitido por las simetrías de la matriz) restringen la distribución de probabilidad $P(H)$ a la forma [47]

$$P_{N,\beta}(H) = C_{N,\beta} \exp\left(-\frac{\beta}{2} \text{Tr}H^2\right) \quad (2.1)$$

donde la contante $C_{N,\beta}$ asegura normalización y $\text{Tr}H^2$ es la traza del cuadrado de la matriz H . De la ecuación anterior podemos ver que los elementos de matriz independientes tienen una distribución Gaussiana. Para ejemplificar esto, consideremos una matriz simétrica real de 2×2 , para la cual

$$P_{2,1}(H) = C_{2,1} \exp\left(-\frac{1}{2}(H_{11}^2 + H_{22}^2 + 2H_{12}^2)\right) \quad (2.2)$$

lo cual muestra que cada elemento de matriz es una variable aleatoria con una distribución Gaussiana y la varianza de los elementos fuera de la diagonal es la mitad que la de los elementos diagonales. Distribuciones de probabilidad con una expresión más general son obtenidas para otros ensambles en donde los elementos de matriz no son requeridos a ser estadísticamente independientes. Es así como las tres clases de simetría (ortogonal, unitaria o simpléctica) junto con la densidad de probabilidad de la ecuación (2.1) definen a los ensambles Gaussianos clásicos.

Para construir una matriz del ensamble ortogonal Gaussiano, los elementos diagonales de la matriz, H_{nn} , son obtenidos de una distribución Gaussiana con promedio cero y varianza uno, mientras que los elementos fuera de la diagonal, H_{mn} con $m < n$, son obtenidos de una distribución Gaussiana con promedio cero y varianza igual a un medio. Los elementos restantes, H_{mn} con $m > n$, son obtenidos haciendo uso de la simetría de la matriz, $H_{mn} = H_{nm}$. Para

construir una matriz del ensamble unitario Gaussiano, los elementos diagonales, H_{nn} , también son obtenidos de una distribución Gaussiana con promedio cero y varianza igual a uno. Las partes real e imaginaria de los elementos fuera de la diagonal, H_{mn} con $m < n$, son independientes y cada una de ellas es obtenida de una distribución Gaussiana con promedio cero y varianza igual a un medio. De nuevo los elementos restantes, H_{mn} con $m > n$, son obtenidos haciendo uso de la simetría de la matriz, $H_{mn} = H_{nm}^*$. Una matriz del ensamble simpléctico Gaussiano es construida con elementos cuaterniónicos reales. Los espectros obtenidos al diagonalizar las matrices de cada uno de los ensambles anteriores son mostrados en la Figura 2.1.

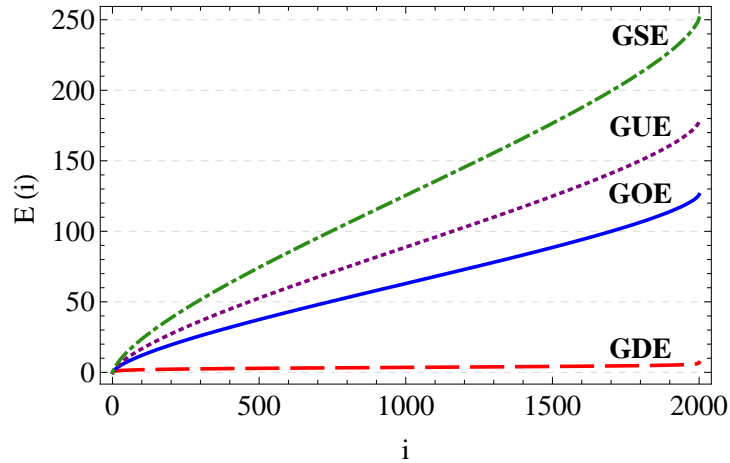


Figura 2.1: Espectros de energía correspondientes a un espectro Poissoniano, algunas veces referido también como GDE (línea roja rayada), un espectro GOE (línea azul continua), un espectro GUE (línea morada punteada), y un espectro GSE (línea verde punteada y rayada). Los espectros corresponden a promedios sobre un ensamble de $n = 10$ matrices.

En todos los casos mencionados los eigenvalores obtenidos al diagonalizar a la matriz aleatoria H corresponden con los niveles de energía del sistema cuántico modelado, sin embargo tales eigenvalores o niveles de energía no están distribuidos uniformemente. Esto se debe a que la densidad de niveles $\rho(E)$ no es una función universal puesto que depende de los detalles del modelo de matriz aleatoria los cuales no son dictados por las simetrías. Antes de poder estudiar las propiedades de fluctuación es necesario deshacernos de este comportamiento no universal. Los detalles del procedimiento son mostrados en la siguiente sección.

2.2. Unfolding

Recordemos que lo que deseamos estudiar son las propiedades estadísticas de los espectros cuánticos, las cuales a su vez, nos proporcionarán información acerca de las correlaciones

entre sus niveles de energía. Sin embargo, queremos medir las correlaciones espectrales independientemente de las propiedades globales del espectro. Así, antes de que podamos estudiar las propiedades de fluctuación locales es necesario remover la densidad de niveles del espectro mediante un proceso denominado unfolding.

Dado un espectro de un sistema cuántico, todos los niveles que tienen los mismos números cuánticos forman un subespectro. Denotaremos por E_i , para $i = 1, \dots, N$, las posiciones de los niveles de energía para un determinado subespectro. Consideremos a $\rho(E)$, la densidad de niveles E_i como función de la energía E , es decir, el número de niveles contenidos en un intervalo unitario de energía, la cual está dada por

$$\rho(E) = \sum_i \delta(E - E_i) \quad (2.3)$$

La correspondiente función cumulativa de niveles E_i , $\mathcal{N}(E)$, la cual nos da el número de niveles con una energía menor o igual a E , es

$$\mathcal{N}(E) = \int_{-\infty}^E \rho(E') dE' \quad (2.4)$$

Por lo tanto, $\mathcal{N}(E)$ es una función escalón la cual se incrementa en una unidad cada vez que $E = E_i$. Para ilustrar esto, consideremos los eigenvalores de una matriz del ensamble GOE de dimensión $N = 20$, construida como fue descrito en la sección anterior. La gráfica de $\mathcal{N}(E)$ para este ejemplo es mostrada en la Figura 2.2. Como se puede apreciar, la función $\mathcal{N}(E)$ presenta un comportamiento promedio suave, $\bar{\mathcal{N}}(E)$, el cual es indicado por la curva continua de color rojo. De este modo podemos considerar a la función $\mathcal{N}(E)$ como la suma de esta parte suave $\bar{\mathcal{N}}(E)$ más una parte fluctuante $\tilde{\mathcal{N}}(E)$, tal que

$$\mathcal{N}(E) = \bar{\mathcal{N}}(E) + \tilde{\mathcal{N}}(E) \quad (2.5)$$

Para poder estudiar las fluctuaciones $\tilde{\mathcal{N}}(E)$, es decir, las fluctuaciones de la función $\mathcal{N}(E)$ alrededor de $\bar{\mathcal{N}}(E)$, es necesario contar con un procedimiento que nos permita separar apropiadamente la función $\mathcal{N}(E)$ en una parte suave o global $\bar{\mathcal{N}}(E)$ y una parte fluctuante o local $\tilde{\mathcal{N}}(E)$. En términos de la densidad de niveles $\rho(E)$, necesitamos implementar un método de suavizamiento de $\rho(E)$ que nos permita obtener $\bar{\rho}(E)$, la densidad promedio de niveles E_i como función de la energía E , lo que a su vez nos permitirá obtener $\bar{\mathcal{N}}(E)$, la función cumulativa promedio de niveles E_i , la cual nos da el número promedio de niveles con una energía menor o igual a E , a través de la siguiente relación

$$\bar{\mathcal{N}}(E) = \int_{-\infty}^E \bar{\rho}(E') dE' \quad (2.6)$$

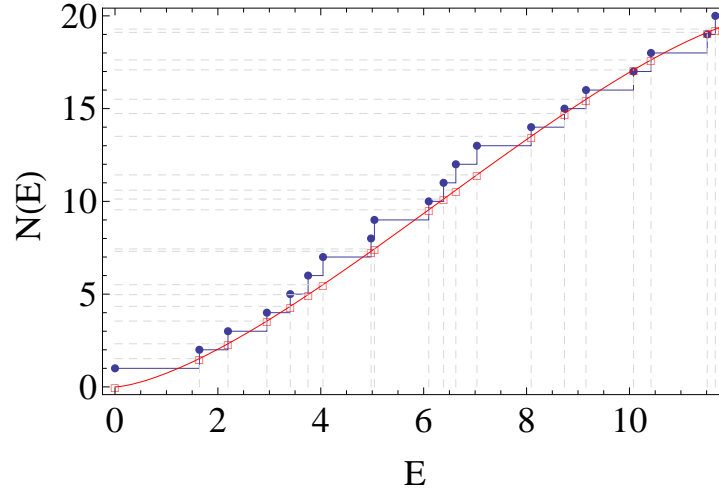


Figura 2.2: Gráfica de la función escalón $\mathcal{N}(E)$, así como su comportamiento suave $\tilde{\mathcal{N}}(E)$ (curva roja suave) para un espectro GOE con veinte niveles de energía.

La separación anterior nos permitirá además mapear el espectro $E(i)$ a uno nuevo, $\epsilon(i)$, tal que

$$\epsilon_i = \overline{\mathcal{N}}(E_i). \quad (2.7)$$

A diferencia de $E(i)$, el nuevo espectro resultante $\epsilon(i)$, tendrá un espaciamiento promedio uniforme igual a uno ($\langle s_i \rangle = 1$; $s_i = \epsilon_{i+1} - \epsilon_i$), y las energías ϵ_i tendrán una distribución uniforme. A este proceso de separar a la función $\mathcal{N}(E)$ en una parte suave y una parte fluctuante como se señala en la ecuación (2.5), y mapear al espectro $E(i)$ por medio de la ecuación (2.7) se le conoce como *unfolding*. De esta forma $\mathcal{N}(\epsilon)$, la función cumulativa de niveles ϵ_i , tendrá una forma de escalera fluctuando a lo largo de una línea recta de pendiente igual a uno, tal como se muestra en la Figura 2.3.

Una vez que hemos efectuado el unfolding es posible comparar las propiedades de fluctuación de sistemas con distintos comportamientos globales, como por ejemplo, comparar las fluctuaciones en las posiciones de los niveles de energía entre núcleos con densidades de niveles diferentes, o incluso comparar sistemas totalmente diferentes tales como una secuencia de números primos y una secuencia de ceros de la función zeta de Riemann.

El unfolding es simple si existe una fórmula analítica para describir la densidad de niveles global $\overline{\rho}(E)$ para el sistema bajo estudio. Por ejemplo, en el caso de billares, es posible separar las propiedades globales de las propiedades locales de una manera precisa por medio de la fórmula de Weyl

$$\overline{\mathcal{N}}(E) = \frac{\pi}{4}(SE - L\sqrt{E} + K) \quad (2.8)$$

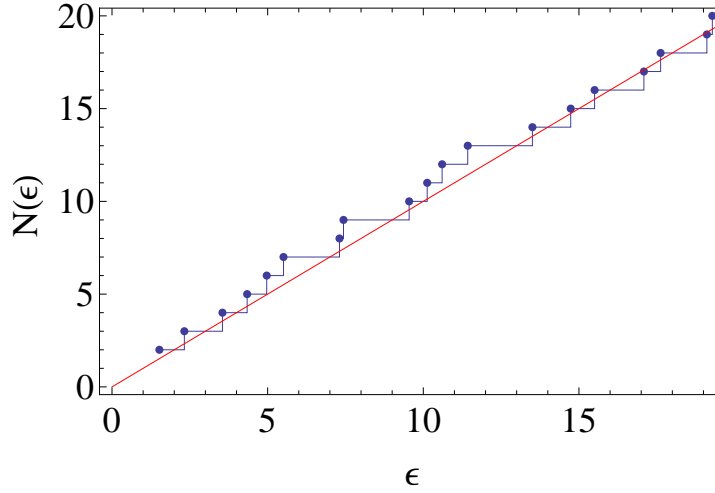


Figura 2.3: Función escalón unfoldeada $\mathcal{N}(\epsilon)$, correspondiente a la función escalón $\mathcal{N}(E)$ de la Figura 2.2. La línea roja es una recta de pendiente igual a uno.

donde S es la superficie del billar y L su perímetro, mientras que $K \approx 1$. En el caso de los ensambles Gaussianos clásicos Wigner derivó la densidad promedio de la secuencia de eigenvalores de una matriz aleatoria, la cual está dada por

$$\bar{\rho}(E) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \sqrt{2N - E^2} & \text{para } |E| < \sqrt{2N} \\ 0 & \text{para } |E| > \sqrt{2N} \end{cases} \quad (2.9)$$

La expresión anterior es conocida como la *ley semicircular de Wigner* y es válida para los tres ensambles Gaussianos clásicos GOE, GUE y GSE en el límite $N \rightarrow \infty$. Al integrar la ecuación anterior obtenemos la siguiente función cumulativa promedio de niveles

$$\bar{\mathcal{N}}(E) = \frac{1}{2\pi} \left(E\sqrt{2N - E^2} + 2N \sin^{-1} \left(\frac{E}{\sqrt{2N}} \right) + \pi N \right) \quad (2.10)$$

Sin embargo, una fórmula analítica para $\bar{\rho}(E)$ en la mayoría de los casos es desconocida. En la práctica, para matrices de dimensión finita, el procedimiento usual consiste en usar una aproximación suave, frecuentemente un polinomio de grado bajo arbitrario, a la función cumulativa de niveles, $\mathcal{N}(E)$, y así obtener a $\tilde{\mathcal{N}}(E)$. Una vez que hemos unfoldeado el espectro de energías, es posible estudiar las fluctuaciones en el espectro de eigenvalores por medio de una serie de estadísticas las cuales nos darán información acerca de las correlaciones de corto o largo alcance presentes en el espectro. Sin embargo, los resultados obtenidos pueden ser bastante sensibles al procedimiento de unfolding empleado (en caso de ajustar un polinomio los resultados pueden variar drásticamente dependiendo del grado del polinomio empleado).

2.3. Medidas estadísticas de fluctuación espectral

Una estadística en RMT es una función la cual puede ser calculada a partir de una secuencia de niveles. Las medidas estadísticas de fluctuación espectral describen las correlaciones entre dos o más eigenvalores unfoldeados de los espectros de matrices aleatorias. Algunas de las estadísticas comúnmente empleadas son la distribución de espaciamientos del vecino más cercano (NNSD), la varianza del número de niveles Σ^2 y la estadística Δ_3 . El NNSD describe las correlaciones entre dos eigenvalores consecutivos por lo cual se dice que es una medida de fluctuación espectral de corto alcance, mientras que medidas tales como Σ^2 y Δ_3 describen las propiedades de correlación entre un número mayor de eigenvalores razón por la cual se les conoce como medidas de fluctuación de largo alcance. Otras medidas para describir las fluctuaciones de nivel, las cuales no estudiaremos aquí, son la función de correlación espectral de n puntos $R_n(x_1, \dots, x_n)$, la cual describe las correlaciones entre n eigenvalores y es definida como la distribución de probabilidad conjunta para encontrar eigenvalores en x_1, \dots, x_n , así como la función de agrupamiento de n niveles $T_n(x_1, \dots, x_n)$, la cual describe las correlaciones de n nivel puras donde las correlaciones de orden más bajo han sido sustraídas. A continuación describimos las primeras tres medidas de fluctuación espectral mencionadas anteriormente.

2.3.1. Distribución de espaciamientos del vecino más cercano (NNSD)

La distribución de espaciamientos del vecino más cercano (NNSD, por sus siglas en inglés) $p(s)$ nos muestra como fluctúan los espaciamientos entre los niveles consecutivos de energía unfoldeados alrededor del espaciamiento promedio. La distribución $p(s)$ es definida como la densidad de probabilidad de que dos niveles unfoldeados adyacentes estén separados por una distancia s . De este modo $p(s)ds$ es la probabilidad de que s tenga un valor entre s y $s + ds$. Equivalentemente, dado un nivel de energía en ϵ , $p(s)ds$ es la probabilidad de no haya nivel en el intervalo $(\epsilon, \epsilon + s)$ y tener un nivel en $(\epsilon + s, \epsilon + s + ds)$.

Una vez que hemos unfoldeado el espectro de energías, para obtener la NNSD primero calculamos los espaciamientos s_i entre niveles consecutivos, ϵ_i y ϵ_{i+1} es decir, calculamos $s_i \equiv \epsilon_{i+1} - \epsilon_i$, y posteriormente construimos un histograma con dichos espaciamientos. La distribución que exhiban los espaciamientos será determinada por las propiedades de correlación entre ellos. Por ejemplo, si las posiciones de los niveles de energía no están correlacionadas, la distribución de espaciamientos sigue una distribución de Poisson, es decir, es de la forma

$$p(s) = \exp(-s) \quad (2.11)$$

La gráfica de esta distribución se muestra en la Figura 2.4. Note que la distribución de Poisson tiene su máximo en $s = 0$, indicando que los espaciamientos pequeños tienen una mayor probabilidad de ocurrencia (no hay repulsión de niveles). Esta tendencia de los niveles de

energía a estar demasiado cerca es conocida como agrupamiento de niveles. Ha sido mostrado que los espaciamientos entre los niveles de energía de sistemas cuánticos integrables con más de un grado de libertad (con excepción del oscilador armónico) no están correlacionados [40], y que la distribución de espaciamientos del vecino más cercano para tales sistemas es del tipo Poisson.

Las distribuciones de espaciamientos para los ensambles Gaussianos clásicos son muy similares a las que Wigner derivó para los ensambles de matrices aleatorias de 2×2 [5, 39], las cuales también son mostradas en la Figura 2.4, en donde la distribución correspondiente a GOE es la curva continua azul, para GUE es la curva punteada morada y para GSE es la curva rayada y punteada verde; en los tres casos tales distribuciones excluyen degeneraciones, $p(0) = 0$. Además, los eigenvalores unfoldeados de una matriz aleatoria están correlacionados y tienden a repelerse unos a otros, por lo cual los espaciamientos pequeños son poco probables. A esta tendencia de los niveles de energía a evitar agruparse se le conoce como repulsión de niveles. Dicha repulsión se ha encontrado en los espectros de sistemas cuánticos con dos grados de libertad y cuyos análogos clásicos [48, 49] son fuertemente caóticos.

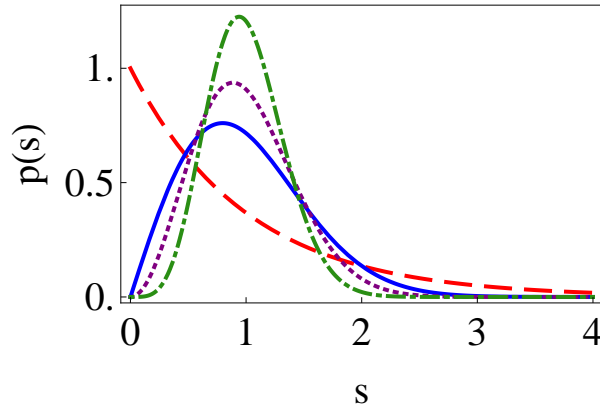


Figura 2.4: Predicción teórica para la distribución de espaciamientos del vecino más cercano (NNSD) para un sistema cuyos niveles de energía no están correlacionados (línea roja rayada) y para las distribuciones de espaciamientos de los ensambles Gaussianos clásicos; GOE (línea azul continua), GUE (línea morada punteada) y GSE (línea verde punteada y rayada).

Explícitamente, la distribución de Wigner para los espaciamientos entre eigenvalores unfoldeados de una matriz del ensamble ortogonal Gaussiano es

$$p_1(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right) \quad (2.12)$$

Note que cuando $s \rightarrow 0$ la distribución anterior decrece linealmente a cero. Es por esto que la repulsión exhibida por los eigenvalores del ensamble ortogonal Gaussiano se dice que es

lineal. La distribución para los espaciamientos de los eigenvalores unfoldeados de una matriz del ensamble unitario Gaussiano es

$$p_2(s) = \frac{32}{\pi^2} s^2 \exp\left(-\frac{4}{\pi} s^2\right) \quad (2.13)$$

En este caso cuando $s \rightarrow 0$ la distribución anterior decrece cuadráticamente a cero y es por ello que la repulsión exhibida por los eigenvalores del ensamble unitario Gaussiano se dice que es cuadrática. Los eigenvalores de una matriz del ensamble simpléctico Gaussiano exhiben una repulsión cuártica, ya que poseen la siguiente distribución de espaciamientos

$$p_4(s) = \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} s^4 \exp\left(-\frac{64}{9\pi} s^2\right) \quad (2.14)$$

De esta manera vemos que la diferencia entre los tres ensambles Gaussianos clásicos es notable para espaciamientos pequeños, puesto que en este caso $p^\beta(s) \sim s^\beta$, es decir, mientras más grande sea el valor de β más fuerte será la repulsión entre los eigenvalores.

2.3.2. Varianza del número de niveles Σ^2

Una de las propiedades de los espectros debida a las correlaciones entre los espaciamientos de nivel es la rigidez espectral. Se dice que un espectro es *rígido* si la fluctuación del número de niveles encontrados en un intervalo de energía de longitud dada, alrededor de su promedio es muy pequeña. Por otra parte, si los espaciamientos entre niveles no están correlacionados se dice entonces que el espectro es *suave*. De este modo el valor de la rigidez espectral reflejará el grado de regularidad del espectro.

Una de las medidas de fluctuación espectral que cuantifican la rigidez del espectro es la denominada varianza del número de niveles, Σ^2 , la cual es definida como la varianza promedio del número de niveles, $n(L)$, encontrados en un intervalo unfoldeado de longitud L . De esta forma tenemos que Σ^2 está dada por

$$\begin{aligned} \Sigma^2(L) &= \langle (n(L, \epsilon) - \langle n(L, \epsilon) \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle n(L, \epsilon)^2 \rangle - \langle n(L, \epsilon) \rangle^2 \end{aligned} \quad (2.15)$$

donde $n(L, \epsilon)$ cuenta el número de niveles en el intervalo $[\epsilon, \epsilon + L]$ y $\langle \cdot \rangle$ denota el promedio sobre los puntos ϵ , es decir, indica un promedio sobre el espectro. Para una secuencia de niveles no correlacionados, como es el caso de un espectro Poissoniano, tenemos

$$\Sigma^2(L) = L \quad (2.16)$$

Así, para un espectro suave, la varianza del número de niveles Σ^2 dentro de una ventana de energías aumenta linealmente con el tamaño de la ventana. Para los ensambles Gaussianos clásicos y para valores de L grandes, el aumento de Σ^2 es menor que lineal. En estos casos Σ^2 depende logarítmicamente de L en la forma:

$$\Sigma_1^2(L) = \frac{2}{\pi^2} \left[\log(2\pi L) + \gamma + 1 - \frac{\pi^2}{8} \right] \quad (2.17)$$

$$\Sigma_2^2(L) = \frac{1}{\pi^2} [\log(2\pi L) + \gamma - 1] \quad (2.18)$$

$$\Sigma_2^2(L) = \frac{1}{2\pi^2} \left[\log(4\pi L) + \gamma + 1 + \frac{\pi^2}{8} \right] \quad (2.19)$$

donde γ es la constante de Euler. Esta dependencia logarítmica indica que los espaciamientos grandes y pequeños no suceden al azar sino de una manera casi alternada, reflejando la rigidez de los espectros.

2.3.3. Δ_3

Otra medida del grado de rigidez del espectro es obtenida por medio de la estadística Δ_3 introducida por Dyson y Mehta [5-13]. Como vimos en la sección tal, $\mathcal{N}(\epsilon)$, la función acumulativa de niveles ϵ_i , tiene una forma de escalera a lo largo de una línea recta de pendiente igual a uno cuando consideramos la totalidad del espectro unfoldeado, sin embargo, en un subintervalo, $[\epsilon, \epsilon + L]$, la mejor aproximación a la función $\mathcal{N}(\epsilon)$ será, en general, una recta de pendiente diferente a uno. La estadística Δ_3 es definida, para un intervalo unfoldeado $[\epsilon, \epsilon + L]$ de longitud L , como la desviación promedio de la función $\mathcal{N}(\epsilon)$ de la mejor línea recta ajustándola por el método de mínimos cuadrados:

$$\Delta_3(L) = \frac{1}{L} \left\langle \text{Min}_{A,B} \int_{\epsilon}^{\epsilon+L} dx [\mathcal{N}(x) - Ax - B]^2 \right\rangle \quad (2.20)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ denota el promedio sobre los puntos ϵ , es decir, un promedio espectral. Para una L dada, mientras más pequeño sea Δ_3 , más fuerte será la rigidez. Para un espectro suave, es decir, no correlacionado, sin repulsión de niveles tenemos

$$\Delta_3(L) = L/15 \quad (2.21)$$

Para los ensambles Gaussianos clásicos, al igual que con la varianza del número de niveles Σ^2 , $\Delta_3(L)$, depende logarítmicamente de L para valores grandes de L . El valor para el

promedio de ensamble de $\Delta_3(L)$ es [3-22]:

$$\Delta_{3,1}(L) = \frac{1}{\pi^2} \left[\log(2\pi L) + \gamma - \frac{5}{4} - \frac{\pi^2}{8} \right] \quad (2.22)$$

$$\Delta_{3,2}(L) = \frac{1}{2\pi^2} \left[\log(2\pi L) + \gamma - \frac{5}{4} \right] \quad (2.23)$$

$$\Delta_{3,4}(L) = \frac{1}{4\pi^2} \left[\log(4\pi L) + \gamma - \frac{5}{4} + \frac{\pi^2}{8} \right] \quad (2.24)$$

donde γ es la constante de Euler. Para el oscilador armónico el resultado es

$$\Delta_3 = \frac{1}{12} \quad (2.25)$$

La relación entre $\Sigma^2(L)$ y $\Delta_3(L)$ esta dada por [4-22]:

$$\Delta_3(L) = \frac{2}{L^4} \int_0^L (L^3 - 2L^2\ell + \ell^3) \Sigma^2(\ell) d\ell \quad (2.26)$$

Una forma práctica para calcular $\Delta_3(L)$ sobre un intervalo dado $[\epsilon, \epsilon + L]$ es la siguiente. Definimos al centro del intervalo como nuestro origen, es decir, definimos $\tilde{\epsilon}_i = \epsilon_i - (\alpha + L/2)$, y entonces calculamos

$$\begin{aligned} \Delta_3(L) = & \frac{n^2}{16} - \frac{1}{L^2} \left[\sum_{i=1}^n \tilde{\epsilon}_i \right]^2 + \frac{3n}{2L^2} \left[\sum_{i=1}^n \tilde{\epsilon}_i^2 \right] - \frac{3}{L^4} \left[\sum_{i=1}^n \tilde{\epsilon}_i^2 \right]^2 \\ & + \frac{1}{L} \left[\sum_{i=1}^n (n - 2i + 1) \tilde{\epsilon}_i \right] \end{aligned} \quad (2.27)$$

Capítulo 3

Unfolding adaptado a los datos

3.1. Unfolding de ensambles de espectros mediante SVD

En este apartado consideraremos ensambles de espectros Poisson y GOE. Los espectros serán unfoldeados en una forma adaptada a los datos aplicando Singular Value Decomposition (SVD) al ensamble, encontrando que las fluctuaciones están caracterizadas por las siguientes leyes de potencias

$$P(f) \propto \frac{1}{f^\beta} \quad (3.1)$$

$$\lambda(k) \propto \frac{1}{k^\gamma} \quad (3.2)$$

Otros resultados, tales como la reconstrucción de las medidas de fluctuación tradicional (NNSD, Σ_2 y Δ_3), el estudio de espectros transicionales entre los límites Poisson y GOE, y el unfolding de espectros individuales con una variante del SVD, el Singular Spectrum Analysis (SSA), serán discutidos en el siguiente apartado.

Consideremos un ensamble de $m = 1, \dots, M$ eigenespectros $E^{(m)}(n)$, cada uno de los cuales consiste de $n = 1, \dots, N$ niveles. Cada espectro es convenientemente acomodado en una fila de la matriz \mathbf{X} de dimensiones $M \times N$, la cual puede ahora ser interpretada como una serie de tiempo multivariada,

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} E^{(1)}(1) & E^{(1)}(2) & \dots & E^{(1)}(N) \\ E^{(2)}(1) & E^{(2)}(2) & \dots & E^{(2)}(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ E^{(M)}(1) & E^{(M)}(2) & \dots & E^{(M)}(N) \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Como vimos en la sección 1.4 del Capítulo 1, SVD puede descomponer a la matriz \mathbf{X} en la siguiente forma

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T = \sum_{k=1}^r \sigma_k \hat{\mathbf{u}}_k \hat{\mathbf{v}}_k^T \quad (3.4)$$

Así, cualquier elemento de matriz de \mathbf{X} puede ser escrito de la siguiente manera

$$\mathbf{X}_{mn} = \sum_{k=1}^r \sigma_k \hat{\mathbf{u}}_{km} \hat{\mathbf{v}}_{kn}^T \quad (3.5)$$

Una fila de la matriz o una realización particular del espectro de excitación $E^{(m)}(n)$ puede entonces ser escrito como,

$$E^{(m)}(n) = \sum_{k=1}^r \sigma_k g_k^{(m)}(n) \quad (3.6)$$

donde $g_k^{(m)}(n) = \hat{\mathbf{u}}_{km} \hat{\mathbf{v}}_{kn}^T$. De esta forma es posible descomponer cada espectro como la suma de componentes de series de tiempo $g_k^{(m)}(n)$. Un espectro es una función monótona que tiene una tendencia dominante, con fluctuaciones superpuestas que típicamente son órdenes de magnitud más pequeñas. Consecuentemente, la variabilidad de un espectro será debida principalmente a sus componentes de tendencia, las cuales están caracterizadas por varianzas parciales $\lambda_k = \sigma_k^2$ que son mucho más grandes que las varianzas parciales asociadas a las componentes de fluctuación. Así, en la ecuación (1.20), podemos ser capaces de separar a la tendencia $\bar{E}(i)$ de las fluctuaciones $\tilde{E}(i)$ para cada uno de los espectros que conforman el ensamble, en una forma adaptada a los datos, mediante

$$\bar{E}^{(m)}(n) = \sum_{k=1}^{n_T} \sigma_k g_k^{(m)}(n) \quad (3.7)$$

$$\tilde{E}^{(m)}(n) = \sum_{k=n_T+1}^r \sigma_k g_k^{(m)}(n) \quad (3.8)$$

donde n_T es el número de componentes a ser incluidas como tendencia.

En la Figura 3.1, son mostrados los resultados de aplicar SVD a ensambles GOE y Poisson con $M = 100, 500, 2000$ realizaciones $E^{(m)}(n)$, donde cada espectro contiene $N = 2000$ niveles. Para tomar en cuenta solo la parte central del espectro (dentro de dos desviaciones estándar), 2.5 % de los niveles inferiores y superiores fueron descartados. Del scree diagram de varianzas parciales ordenadas se sigue que λ_1 y λ_2 son órdenes de magnitud más grandes que las otras varianzas parciales, y que ellas son responsables de la mayor parte de la varianza total λ_{tot} , tanto en el caso de GOE como de Poisson.

A continuación, serán presentados los resultados para tamaños de ensamble intermedios de $M = 500$. Para M pequeño el rango de la ley de potencias es reducido, mientras que para M muy grande la base $\{V_k, k = 1, \dots, r\}$ puede llevar a una cola de varianzas parciales λ_k insignificanamente pequeñas en el scree diagram. Sin embargo, los resultados estadísticos son independientes de la elección particular de M . Note que los vectores V_k con $k \geq 3$ corresponden con los modos normales de fluctuación de la referencia [50,51], los cuales fueron obtenidos después de un paso de unfolding previo. En la presente contribución, tanto los vectores base de la tendencia V_1, V_2 y los vectores base de fluctuación V_k ($k \geq 3$) son obtenidos durante el unfolding adaptado a los datos mismo. No hay diferencia formal entre los vectores base de tendencia y fluctuación, más que los primeros se comportan monótonamente. También en [51], fue establecido que un procedimiento de unfolding apropiado debería reflejar la escala espectral la cual es relevante para las propiedades físicas en cuestión, y que tal escala no siempre es aparente con el procedimiento de unfolding usual. En el contexto de la determinación de la tendencia de series de tiempo no estacionarias, es sabido que sin una referencia a una escala particular, la tendencia será confusamente mezclada con las fluctuaciones locales [52]. En la presente contribución, las diferentes escalas de los modos de tendencia y fluctuación se siguen directamente del scree diagram de varianzas parciales ordenadas λ_k .

También en la Figura 3.1, se muestran los resultados para una realización particular de un espectro Poisson y GOE, para la densidad de niveles promedio $\bar{\rho}(E)$, las fluctuaciones $\tilde{E}^{(m)}(n)$, y el correspondiente espectro de potencias de Fourier $P(f)$, después de la separación adaptada a los datos de los modos de tendencia y fluctuación descrita anteriormente. Puede ser mostrado que en caso GOE, la densidad de niveles global $\tilde{\rho}(E)$ ha convergido a la ley semicircular asintótica. Por otra parte en el caso Poisson, la distribución Gaussiana no describe bien la densidad de niveles global. Así, si bien una fórmula analítica es conocida para describir la densidad de niveles global en el caso asintótico, aquí no puede ser aplicada para llevar a cabo el unfolding de la presente matriz de dimensión finita. Por otra parte, la densidad de niveles global $\bar{\rho}(E)$ puede ser determinada en una forma adaptada a los datos como la densidad $\rho(\bar{E})$ de la aproximación de tendencia suave $\bar{E}^{(m)}(n)$ a un espectro específico de interés. Puede ser visto que $\rho(\bar{E})$ describe bien la densidad de niveles global tanto en el caso Poisson como GOE. Después, en la misma figura, son mostradas las fluctuaciones de nivel $\tilde{E}^{(m)}(n)$ de un espectro Poisson y GOE particular, de acuerdo con la ecuación (3.7), con $n_T = 2$ componentes de tendencia como claramente se sigue del scree diagram. Finalmente, el espectro de potencias de Fourier es presentado para las fluctuaciones de nivel mostradas. Puede ser visto que el espectro de potencias obedece la ley de potencias de la ecuación (3.1) con $\beta = \gamma = 2$ en el caso Poisson, y $\beta = \gamma = 1$ en el caso GOE. Esta ley de potencias es incluso más aparente si el espectro de potencias es promediado sobre todas las realizaciones $m = 1, \dots, M$ del ensamble. Note que cerca de la frecuencia máxima $f = N/2$ (frecuencia de Nyquist), hay una desviación de la ley de potencias, como fue descrito previamente en la referencia [53].

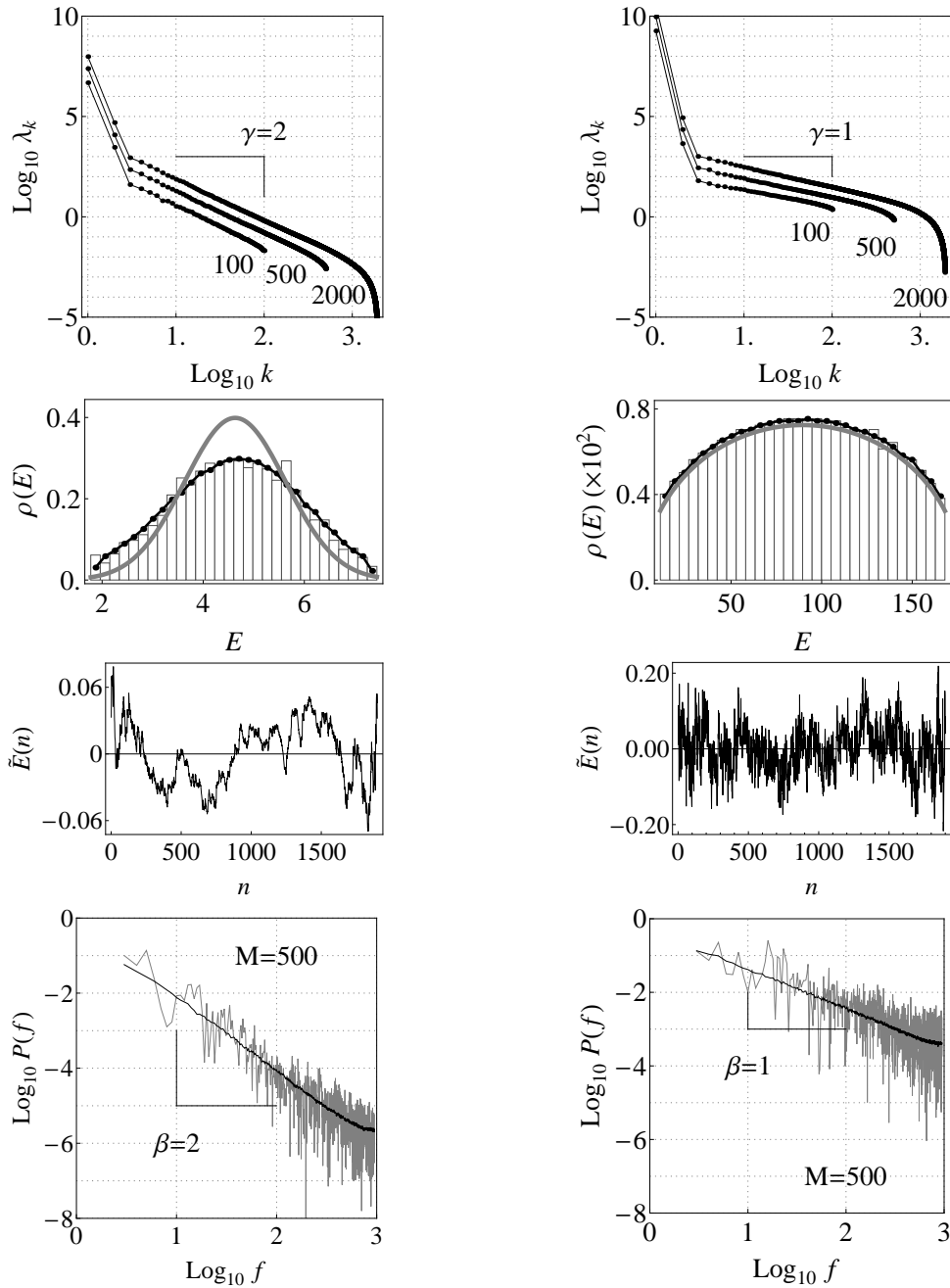


Figura 3.1: Resultados del unfolding adaptado a los datos con SVD de un ensemble de $m = 1 \dots M$ espectros $E^{(m)}(n)$ con $n = 1 \dots N$ niveles para el caso Poisson (imagen izquierda) y el caso GOE

(imagen derecha), usando $M = 100, 500, 2000$ and $N = 2000$. En la primer fila de imágenes se muestra el scree diagram de las varianzas parciales ordenadas λ_k , de las cuales λ_1 y λ_2 corresponden a la tendencia $\overline{E}^{(m)}(n)$, mientras que λ_k con $k = 3 \dots r$ corresponden a las fluctuaciones $\tilde{E}^{(m)}(n)$ y siguen una ley de potencias $\lambda_k \propto 1/k^\gamma$ con $\gamma = 2$ (Poisson) y $\gamma = 1$ (GOE). La varianza total $\lambda_{tot} = \sum_k \lambda_k$ es proporcional al tamaño del ensamble M . En la segunda fila de imágenes se muestra la densidad de niveles $\rho(E)$ (histograma), comparada a la densidad promedio analítica $\bar{\rho}(E)$ (línea gris continua), y a la densidad promedio adaptada a los datos $\rho(\overline{E})$ (línea negra punteada). En la tercera fila se muestran las fluctuaciones $\tilde{E}^{(m)}(n)$. En la fila inferior es mostrado que el correspondiente espectro de potencias de Fourier sigue una ley de potencias $P(f) \propto 1/f^\beta$ con $\beta = \gamma = 2$ (Poisson) y $\beta = \gamma = 1$ (GOE), mostrado para un espectro particular (curva gris) y para el promedio sobre el ensamble (curva negra).

En la Figura 3.2 puede ser visto que los vectores base asociados V_1 y V_2 se comportan monótonamente. Basados en estos argumentos, puede ser concluido que los primeros dos vectores constituyen los estados base para la tendencia $\overline{E}^{(m)}(n)$ de cada una de las realizaciones del ensamble de Poisson y GOE, ver ecuación (3.7). Por otra parte, las varianzas parciales de orden más grande λ_k con $3 \leq k \leq r$ se comportan como la ley de potencias de la ecuación (3.2) con $\gamma \approx 2$ (Poisson) y $\gamma \approx 1$ (GOE), tal que ya durante el procedimiento de unfolding uno puede distinguir entre los dos casos. Los vectores V_k , asociados a las varianzas parciales de orden más grande, oscilan, y ellos constituyen los vectores base para las fluctuaciones $\tilde{E}^{(m)}(n)$, ver ecuación (3.8). Puede ser apreciado que mientras más grande sea el número de realizaciones M que contiene el ensamble más grande llega a ser la varianza del ensamble λ_{tot} , y más grande el número de componentes r en los cuales cada espectro es descompuesto.

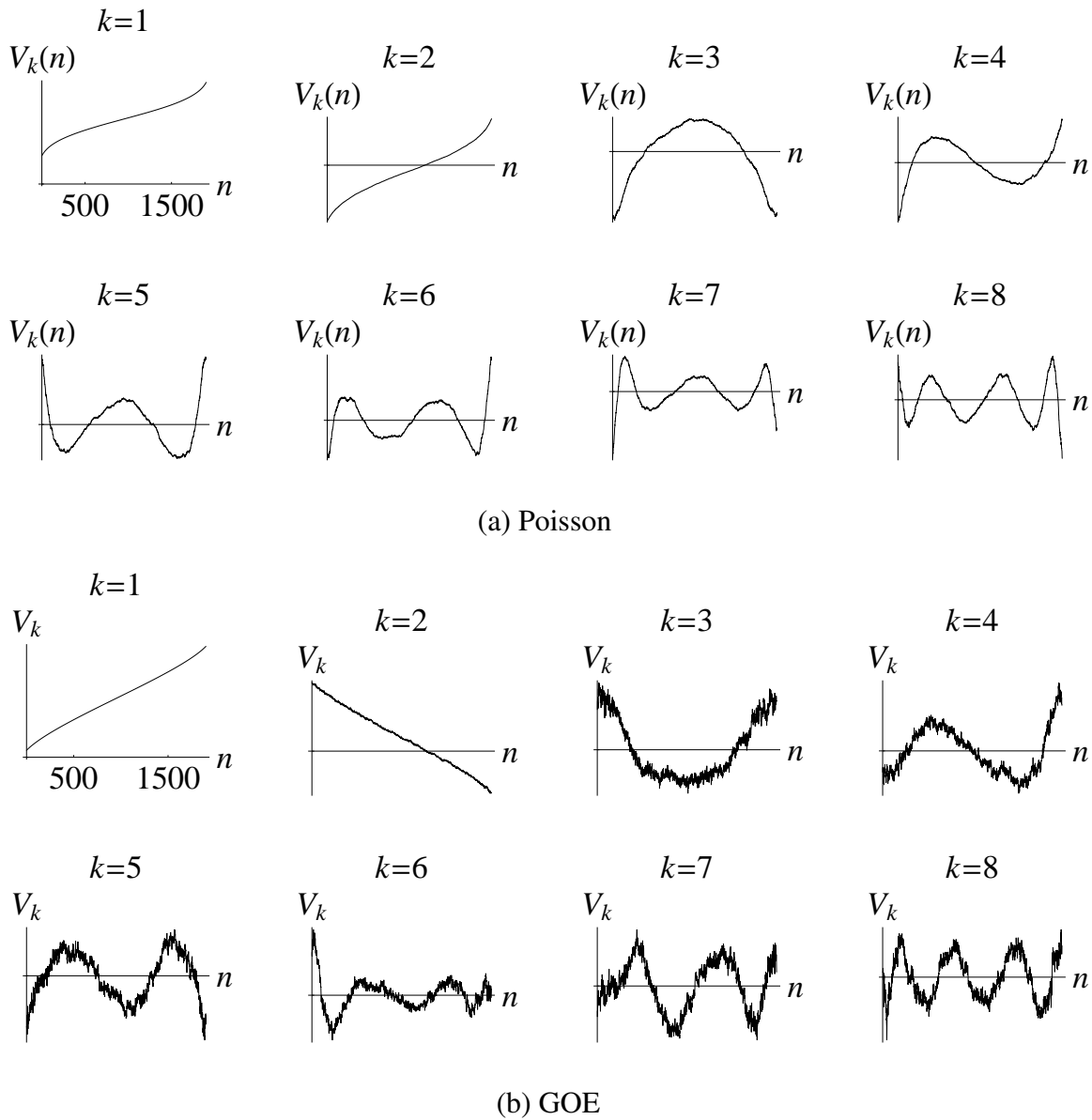


Figura 3.2: Los vectores V_k constituyen una base ortonormal para el ensemble \mathbf{X} de la ecuación (1.14). Los primeros 8 vectores V_k son mostrados, (a) para el caso Poisson, y (b) para el caso GOE. Los vectores V_1 y V_2 son monótonos y sirven como una base para la tendencia $\bar{E}^{(m)}(n)$ de todas las realizaciones $m = 1 \dots M$ del ensemble. Los vectores de orden más alto V_k con $k = 3 \dots r$ oscilan y sirven como una base para las fluctuaciones $\tilde{E}^{(m)}(n)$.

3.2. Unfolding de espectros individuales mediante SSA

Cuando aplicamos el SSA a un espectro de RMT entonces, de acuerdo a la ecuación (1.26), la secuencia de energía $E(i) = \{E_i, \dots, E_N\}$ puede ser descompuesta como $E(i) = \sum_{k=1}^L g_k(i)$. Así, la parte correspondiente a la tendencia,

$$\bar{E}(i) = \sum_{k=1}^{n_T} g_k(i), \quad (3.9)$$

es separada de la parte fluctuante,

$$\tilde{E}(i) = \sum_{k=n_T+1}^L g_k(i) \quad (3.10)$$

y el número de componentes a ser incluidos en la tendencia, n_T , es definido en una manera adaptada a los datos identificando las varianzas parciales dominantes λ_k con $k = 1, \dots, n_T$. Este destendenciamiento corresponde al primer paso del procedimiento de unfolding. Ya durante este paso, se verá que la parte fluctuante obedece una la ley de potencias $\lambda_k \sim 1/k^\gamma$ con $k = n_T+1, \dots, L$, distinguiendo entre espectros suaves ($\gamma \approx 2$) y espectros rígidos ($\gamma \approx 1$). Ahora, las técnicas especializadas del análisis de señales estudiadas anteriormente, pueden ser aplicadas a la parte fluctuante $\tilde{E}(i)$ para caracterizar la estadística de las fluctuaciones. Una ventaja de usar medidas de fluctuación basadas en series de tiempo, tales como el análisis espectral de Fourier o el análisis de fluctuación destendenciada (DFA), es que $\tilde{E}(i)$ no necesita ser reescalado previo al análisis, debido a que en el caso del comportamiento de ley de potencias, la escala es absorbida en el offset, mientras que la información sobre las correlaciones es codificada en el exponente de la ley de potencias, como se verá más adelante. En principio, si uno pudiera unfoldear tanto la función escalón $\mathcal{N}(E)$ como la secuencia de energías $E(i)$ de un eigenespectro dado sin ambigüedades, las fluctuaciones obtenidas, $\tilde{\mathcal{N}}(E)$ y $\tilde{E}(i)$, respectivamente, serían estadísticamente similares. La diferencia más importante es que las primeras fluctuaciones están destendenciadas y reescaladas, mientras que las últimas fluctuaciones están solamente destendenciadas.

Las medidas de fluctuación espectral tradicionales como la distribución de espaciamentos del vecino más cercanos (NNSD), y la estadística Δ_3 , requieren un reescalamiento explícito previo de los niveles de energía. Tal reescalamiento es logrado proyectando las energías de excitación sobre una aproximación suave $\bar{\mathcal{N}}(E)$ a la función de densidad acumulativa o función escalón $\mathcal{N}(E)$, ver ecuación (2.7). En el presente trabajo, esta tendencia suave es obtenida en una forma adaptada a los datos, y una vez obtenida lo que se hace es ajustar una recta entre cada dos puntos adyacentes de la tendencia ajustada a la función escalón. Después de esto, las energías E_i son proyectadas por medio de dichas rectas, tal como se muestra en la Figura 3.3.

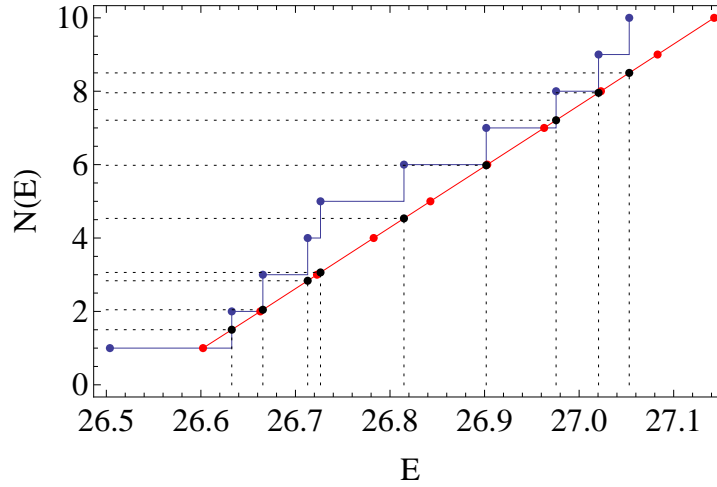


Figura 3.3: Gráfica de la función escalón para los primeros diez elementos de una secuencia de energías $E(i)$ (puntos azules), así como de los puntos correspondientes a la tendencia de la misma obtenida mediante la aplicación del SSA a $E(i)$ (puntos rojos). Los puntos negros corresponden a la proyección de la función escalón $\mathcal{N}(E)$ sobre las rectas ajustadas entre dos puntos consecutivos correspondientes a la tendencia. Al proyectar los puntos negros sobre el eje vertical unfoldeamos el espectro $E(i)$ al espectro $\epsilon(i)$.

A continuación mostramos los resultados de aplicar el SSA a los espectros de un ensemble de $n = 10$ matrices GOE de dimensión $N \times N$, con $N = 2000$. A fin de tomar en cuenta solamente la parte central del espectro (dentro de una desviación estándar), hemos descartado el 16 % de los niveles más bajos y también de los niveles más altos. La Figura 3.4 muestra el diagrama de varianzas parciales λ_k del SSA para tres diferentes valores de la dimensión de encajamiento, a saber, $L = N/20, N/4, N/2$. En los tres casos, las primeras dos varianzas parciales más grandes, λ_1 y λ_2 , se apartan notablemente del resto. Estas varianzas parciales corresponden a las componentes reconstruidas $g_k(i)$ que poseen la mayoría ($> 99.99\%$) de la varianza de la serie de tiempo generalizada original $E(i)$. Las componentes anteriores, por lo tanto, constituyen la tendencia (comportamiento promedio) de la secuencia de energías $E(i)$. El resto de las varianzas parciales λ_k ($k = 3, \dots, L$) se comportan siguiendo una ley de potencias caracterizada por el exponente $\gamma \approx 1$. La suma de las componentes reconstruidas correspondientes a estas varianzas parciales más pequeños constituyen las fluctuaciones locales de los niveles de energía alrededor de la tendencia. Así, la secuencia de energías $E(i)$ ha sido descompuesta en una parte global $\bar{E}(i)$ y una parte localmente fluctuante $\tilde{E}(i)$, de acuerdo a las ecuaciones (3.9) y (3.10).

Es notable que el número de componentes a ser incluidas en la tendencia, n_T , así como γ , no dependen del valor de L . Para un valor de L muy grande ($L \approx N/2$) la descomposición in-

cluye un gran número de varianzas parciales insignificanemente pequeñas, mientras que para L muy pequeño ($L \approx N/20$), el rango sobre el cual el comportamiento de ley de potencias es observado se reduce. Elegiremos un valor de L intermedio, a saber $L = N/4$. En la Figura 3.5,

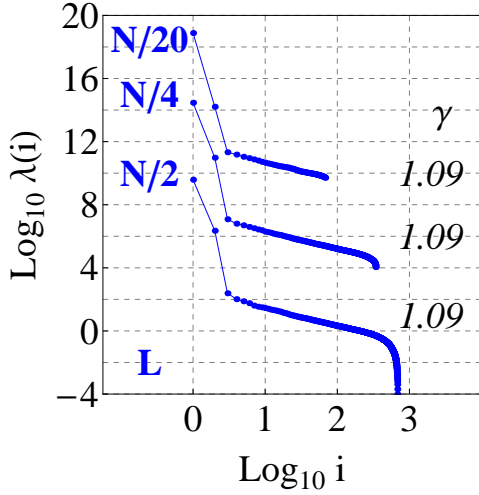


Figura 3.4: Diagrama de varianzas parciales λ_k obtenidos al aplicar el SSA a los espectros de un ensemble de $n = 10$ matrices GOE de dimensión $N \times N$ ($N = 2000$). Las varianzas parciales λ_1 y λ_2 indican que las componentes reconstruidas $g_1(i)$ y $g_2(i)$ corresponden a la tendencia de la secuencia de energías $E(i)$. El resto de varianzas parciales λ_k ($k = 3, \dots, L$) siguen una ley de potencias con exponente $\gamma \approx 1$, independientemente de la dimensión de encajamiento L . Para facilitar la comparación de los resultados, los cuales corresponden a promedios sobre el ensemble, las gráficas para cada valor de L , han sido recorridas verticalmente.

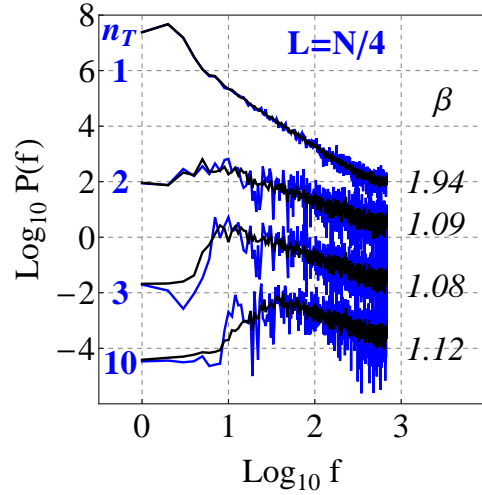


Figura 3.5: Espectro de potencias de la serie de fluctuaciones (secuencia de energías destendenciada) $\tilde{E}(i)$, correspondiente al mismo ensemble de matrices GOE descrito anteriormente. El espectro sigue una ley de potencias caracterizada por el exponente $\beta \approx \gamma \approx 1$, cuando $nT = 2, 3$ o 10 describen la tendencia. El espectro azul corresponde al espectro de una sola matriz mientras que el espectro negro corresponde al promedio sobre el ensemble. Para facilitar la comparación de los resultados, las gráficas para cada valor de nT , han sido recorridas verticalmente.

es mostrado el espectro de potencias de Fourier de la serie de fluctuaciones $\tilde{E}(i)$ para el mismo ensemble de matrices GOE. Los resultados son mostrados para $nT = 1, 2, 3$ y 10 . Lo que podemos observar es que cuando incluimos dos o más componentes en la tendencia, la serie de fluctuaciones corresponde con ruido $1/f$ caracterizado por $\beta \approx 1$, independientemente del valor de nT . Solamente el rango sobre el cual la ley de potencias es observada disminuye cuando más componentes son incluidas en la tendencia. En la Figura 3.6 se muestran los resultados del análisis DFA del ensemble de matrices GOE. Recordemos que el DFA estudia la desviación estándar promedio $F(\ell)$ alrededor de una tendencia lineal local, en función de una cierta

escala o ventana de observación ℓ . Se sabe que para GOE, $F(\ell)$ obedece una ley de potencias, es decir, $F(\ell) \sim \ell^\alpha$, con $\alpha = 1$. En la imagen se muestran resultados de aplicar el DFA a la serie de fluctuaciones $\tilde{E}(i)$ con $nT = 1, 2, 3$ y 10 componentes incluidas en la tendencia. Para $nT \geq 2$ vemos de nuevo que las fluctuaciones se comportan como ruido $1/f$ ($\alpha \approx 1$) y que el rango sobre el cual la ley de potencias es observada disminuye cuando más componentes son incluidas en la tendencia. En la Figura 3.7 mostramos la distribución de espaciamientos del vecino más cercano (NNSD) para el ensamble de matrices GOE. La distribución de Wigner, ecuación 2.12, es obtenida para este caso.

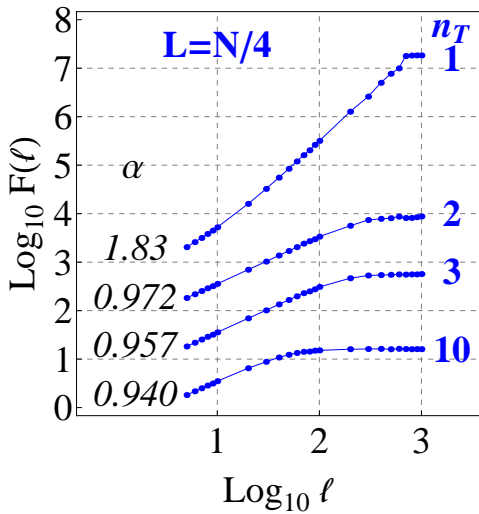


Figura 3.6: Resultados de aplicar el Análisis de Fluctuación Destendenciada (DFA) a la serie de fluctuaciones (secuencia de energías destendenciada) $\tilde{E}(i)$ del ensamble de matrices GOE. Se observa un comportamiento de ley de potencias con $\alpha \approx 1$ para $nT = 2, 3$ ó 10. Para facilitar la comparación de los resultados, los cuales corresponden a promedios sobre el ensamble, las gráficas para cada valor de nT , han sido recorridas verticalmente.

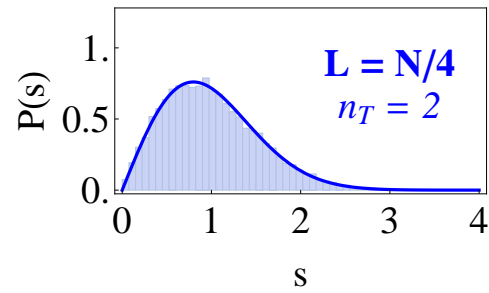


Figura 3.7: Distribución de espaciamientos del vecino más cercano (NNSD) del ensamble de matrices GOE, calculada a partir de los espaciamientos destendenciados (espaciamientos de la serie de energías destendenciada) y reescalados (es decir, mapeados sobre la interpolación lineal de la tendencia encontrada al aplicar el SSA a la secuencia de energías original). El histograma mostrado sigue una distribución de Wigner (línea azul continua) y corresponde a $nT = 2$. Los resultados corresponden a promedios sobre el ensamble.

A continuación se describen los resultados de aplicar el SSA a los espectros de un ensamble de $n = 10$ matrices GDE de dimensión $N \times N$, donde $N = 2000$. El diagrama de varianzas parciales λ_k de la Figura 3.8 muestra también que las varianzas parciales más grandes, λ_1 y λ_2 , se destacan del resto, y en consecuencia, las componentes reconstruidas $g_k(i)$, correspondien-

tes a estas varianzas parciales, describen el comportamiento global de la secuencia de energías $E(i)$. Aquellas varianzas parciales que no forman parte de la tendencia λ_k ($k = 3, \dots, L$), al igual que en el caso de GOE, también siguen una ley de potencias pero caracterizada por $\gamma \approx 2$. La Figura 3.9 muestra el correspondiente espectro de potencias de Fourier. Aquí podemos ver que tanto la tendencia como la serie de fluctuaciones $\tilde{E}(i)$ corresponden con un espectro de potencias Browniano ($\beta \approx 2$) y que de nuevo, ningún cambio apreciable, más que en el rango de escalamiento, es observado cuando el parámetro nT es variado. Los resultados del análisis DFA mostrados en la Figura 3.10, nos dicen que $F(\ell)$ también sigue una ley de potencias, independientemente del número de componentes incluidas en la tendencia, pero caracterizada ahora por $\alpha = 1.5$, lo cual confirma el comportamiento cercano al ruido Browniano de las fluctuaciones. Finalmente la Figura 3.11 muestra la distribución de espaciamentos del vecino más cercano obtenida. Dicho histograma corresponde a una distribución de Poisson, ecuación (2.11).

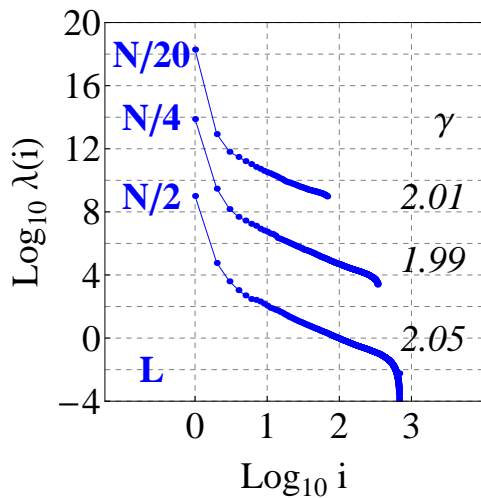


Figura 3.8: Diagrama de varianzas parciales λ_k obtenidos al aplicar el SSA a los espectros de un ensemble de $n = 10$ matrices GDE de dimensión $N \times N$, donde $N = 2000$. Las varianzas parciales λ_1 y λ_2 indican que las componentes reconstruidas $g_1(i)$ y $g_2(i)$ corresponden a la tendencia de la secuencia de energías $E(i)$. El resto de varianzas parciales λ_k ($k = 3, \dots, L$) siguen una ley de potencias con exponente $\gamma \approx 2$, independientemente de la dimensión de encajamiento L . Los resultados corresponden a promedios sobre el ensemble

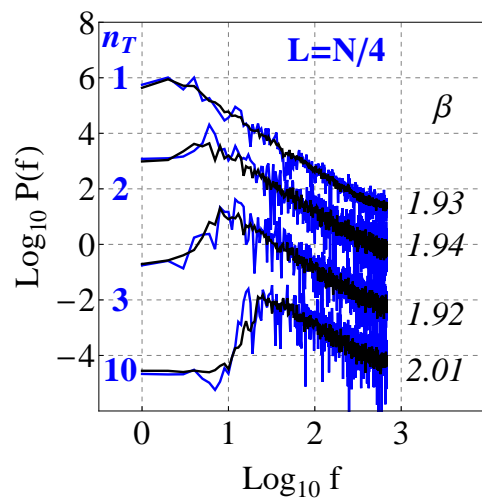


Figura 3.9: Espectro de potencias de la serie de fluctuaciones $\tilde{E}(i)$, correspondiente al ensemble de matrices GDE. El espectro sigue una ley de potencias caracterizada por el exponente $\beta \approx \gamma \approx 2$, sin importar el numero de componentes nT a ser incluidas en la tendencia. El espectro azul corresponde al espectro de una sola matriz mientras que el espectro negro corresponde al promedio sobre el ensemble.

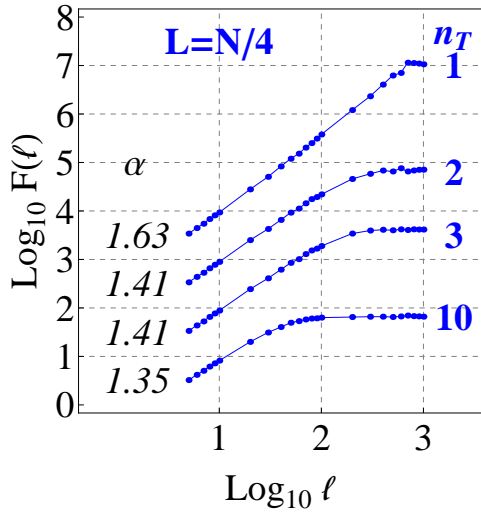


Figura 3.10: Resultados de aplicar el Análisis de Fluctuación Destendenciada (DFA) a la serie de fluctuaciones $\tilde{E}(i)$ del ensamble de matrices GDE. Se observa un comportamiento de ley de potencias con $\alpha \approx 1,5$ para $n_T = 2, 3$. Los resultados corresponden a promedios sobre el ensamble.

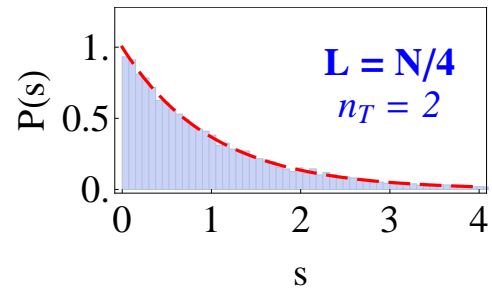


Figura 3.11: Distribución de espaciamientos del vecino más cercano (NNSD) del ensamble de matrices GDE, calculada a partir de los espaciamientos destendenciados y reescalados. El histograma muestra una distribución de Poisson (línea roja rayada) y corresponde a $n_T = 2$. Los resultados corresponden a promedios sobre el ensamble.

3.2.1. Interpolación entre ensambles Gaussianos clásicos

La amplia aplicabilidad de los resultados derivados para los ensambles de matrices aleatorias a problemas físicos aparentemente no conectados con ellos, justifica también el interés en ensambles que interpolan entre los ensambles Gaussianos. En este apartado aplicaremos el SSA a diferentes modelos que, dependiendo del valor de ciertos parámetros, consiguen describir las estadísticas de interés en situaciones intermedias entre los ensambles Gaussianos clásicos anteriormente vistos.

Interpolación entre GDE y GOE

Comenzamos con un modelo propuesto en 1984 por T. H. Seligman *et. al.* [54] y que interpola entre la estadística de Poisson y la estadística de GOE. Se trata de un modelo de matrices aleatorias definido como un ensamble ortogonal Gaussiano cuyos elementos de matriz M_{ij} , son modificados por el factor $e^{-(i-j)^2/\epsilon^2}$. Podemos ver que los elementos diagonales no son afectados por dicho factor y que cuando $\epsilon = 0$ obtenemos la estadística de Poisson, puesto que la matriz resultante es diagonal. Cuando $\epsilon \rightarrow \infty$ obtenemos la estadística de GOE. De esta manera al tomar, $0 < \epsilon < \infty$, logramos una interpolación entre ambos casos límite y obtenemos las correspondientes estadísticas intermedias.

En la Figura 3.12 mostramos los diagramas de las varianzas parciales λ_k obtenidos al aplicar el SSA a los espectros de un ensamble de $n = 10$ matrices de dimension $N = 2000$, y cada uno con un diferente valor del parámetro ϵ , a saber, $\epsilon = 0.1, 25, 100, 200$ y 700 . De nuevo, solamente tomamos en cuenta la parte central del espectro y descartamos el 16 % de los niveles de energía más bajos y más altos. El diagrama de varianzas parciales λ_k es calculado para una dimensión de encajamiento $L = N/4$. Podemos observar que, en todos los casos, las dos varianzas parciales más grandes λ_k ($k = 1, 2$) se separan notablemente del resto. Así, como hemos señalado anteriormente, las correspondientes componentes reconstruidas $g_k(i)$ ($k = 1, 2$), constituyen la tendencia de la secuencia de energías $E(i)$. Las varianzas parciales restantes λ_k ($k = 3, \dots, L$) siguen una ley de potencias cuyo exponente γ varía en función del parámetro ϵ , tomando valores que varían entre $\gamma \approx 2$ ($\epsilon = 0.1$) y $\gamma \approx 1$ ($\epsilon = 700$), logrando así una interpolación entre la estadística de Poisson y la estadística de Wigner, respectivamente. En la Figura 3.13 se muestra el espectro de potencias de Fourier¹ de la serie de fluctuaciones (secuencia de energías destendenciada), $\tilde{E}(i)$, correspondiente a cada uno de los ensambles descritos anteriormente. Para $\epsilon = 0.5$ las fluctuaciones corresponden con la estadística de Poisson, ya que poseen un espectro de potencias Browniano ($\beta \approx 2$). Por otra parte, en el caso de $\epsilon = 700$, la serie de fluctuaciones se aproxima al ruido $1/f$ ($\beta \approx 1$), correspondiendo a la estadística de GOE. Un valor de $\beta = 1.54$ se obtiene para $\epsilon = 25$. Notemos que los valores del

¹Debido a que en el siguiente apartado estudiaremos el así llamado ensamble β -Hermite, de aquí en adelante denotaremos al exponente de la densidad espectral β como β'

exponente β y los del exponente γ para cada uno de los valores de ϵ son muy similares. En la Figura 3.14 mostramos los resultados del análisis DFA de la serie de fluctuaciones, $\tilde{E}(i)$, para los diferentes ensambles. Para $\epsilon = 0.1$ el comportamiento de las fluctuaciones es cercano al ruido Browniano ($\alpha \approx 1.5$), mientras que para $\epsilon = 700$ las fluctuaciones se comportan como ruido $1/f$ ($\alpha \approx 1$). En el Cuadro 3.1 se muestran los resultados, para un rango más amplio de valores del parámetro ϵ , del exponente γ de la ley de potencias exhibida por las varianzas parciales del SSA, del exponente β calculado directamente del espectro de potencias de Fourier, al cual ahora denominamos β_{PS} y del exponente β_{DFA} . La gráfica de estos datos se muestra en la Figura 3.15. En la figura 3.16 mostramos la distribución de espaciamentos del vecino más cercano (NNSD), calculada a partir de los espaciamentos destendenciados (espaciamentos de la serie de energías destendenciada) y reescalados (es decir, mapeados sobre la interpolación lineal de la tendencia encontrada al aplicar el SSA a la secuencia de energías original, véase Sección 3.2), para $\epsilon = 0.1, 25, 100, 200, 700, 1000, 2000$ y 10000 . De acuerdo a estos histogramas podemos observar una interpolación completa entre la distribución de Poisson ($\epsilon = 0.1$) y la distribución de Wigner para un valor de $\epsilon \geq 100$.

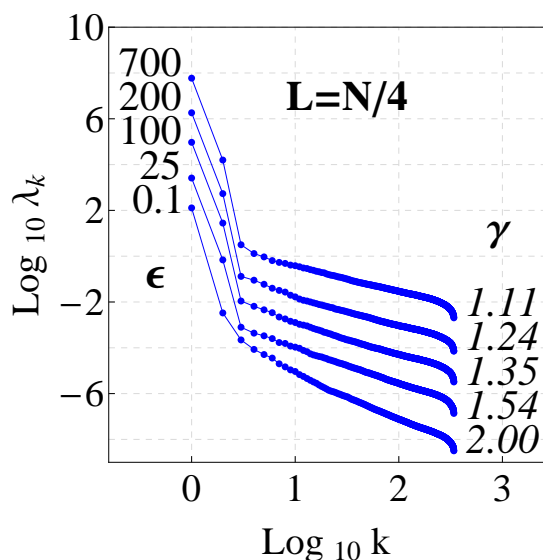


Figura 3.12: Diagramas de varianzas parciales λ_k ($k = 1, \dots, L$) obtenidos al aplicar el SSA a los espectros de un ensamble de $n = 10$ matrices de dimension $N \times N$, ($N = 2000$) para diferentes valores del parámetro ϵ . En todos los casos λ_1 y λ_2 se apartan notablemente del resto de varianzas parciales indicando que las respectivas componentes constituyen la tendencia de la secuencia de energías $E(i)$. Cuando $k = 3, \dots, L$, λ_k sigue una ley de potencias caracterizada por el exponente γ . Al variar ϵ conseguimos una interpolación entre la estadística de Poisson ($\gamma \approx 2$) y la estadística de GOE ($\gamma \approx 1$). Para facilitar la comparación de los resultados, los cuales corresponden a promedios sobre el ensamble, las gráficas para cada valor de ϵ han sido recorridas verticalmente.

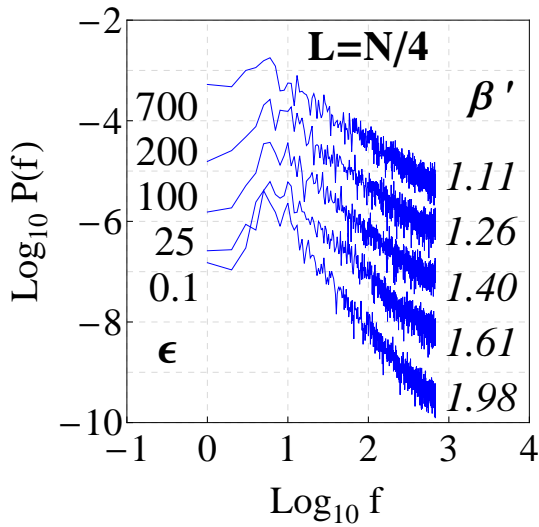


Figura 3.13: Espectro de potencias de la serie de fluctuaciones (secuencia de energías destendenciada) $\tilde{E}(i)$ en función del parámetro ϵ . Se observa un escalamiento de ley de potencias caracterizado por β . Los valores de β son muy similares a los resultados obtenidos para γ , y por lo tanto también describen una interpolación entre la estadística de Poisson ($\beta \approx 2$) y la de GOE ($\beta \approx 1$). Para facilitar la comparación de los resultados, los cuales corresponden a promedios sobre el ensamble, las gráficas para cada valor de ϵ han sido recorridas verticalmente.

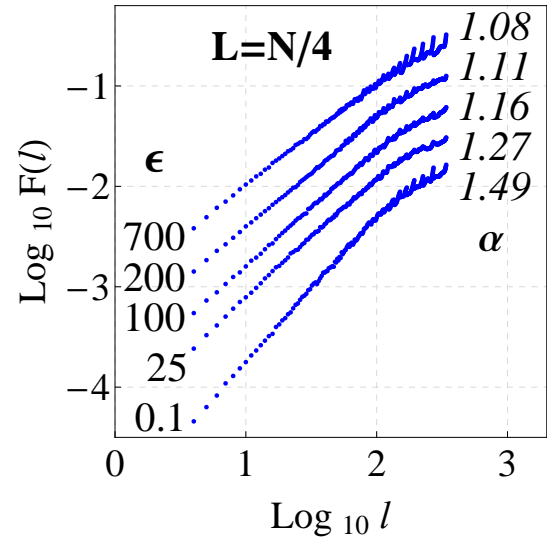


Figura 3.14: Resultados de aplicar el Análisis de Fluctuación Destendenciada (DFA) a la serie de fluctuaciones (secuencia de energías destendenciada) $\tilde{E}(i)$ para distintos valores del parámetro ϵ . Los valores de α varían entre $\alpha \approx 1.5$ (ruido Browniano) para $\epsilon = 0.1$ y $\alpha \approx 1$ (ruido $1/f$) para $\epsilon = 700$. Utilizando la relación $\beta_{DFA} = 1 - 2\alpha$, podemos ver en el Cuadro 3.1 que los resultados de β_{DFA} concuerdan con los valores encontrados para γ y β_{PS} . Para facilitar la comparación de los resultados, los cuales corresponden a promedios sobre el ensamble, las gráficas para cada valor de ϵ han sido recorridas verticalmente.

ϵ	γ	β_{PS}	β_{DFA}
0.1	2.01	1.97	1.97
25	1.54	1.61	1.53
100	1.37	1.39	1.31
200	1.24	1.25	1.21
400	1.18	1.16	1.14
700	1.11	1.11	1.15
1000	1.11	1.17	1.12
2000	1.12	1.13	1.17
10000	1.10	1.12	1.12

Cuadro 3.1: Valores de los exponentes de escalamiento de las fluctuaciones (secuencia de energías destendenciada) $\tilde{E}(i)$; γ , β_{PS} y β_{DFA} en función del parámetro ϵ . Los resultados corresponden a promedios sobre el ensamble. La gráfica de estos datos se muestra en la Figura 3.15.

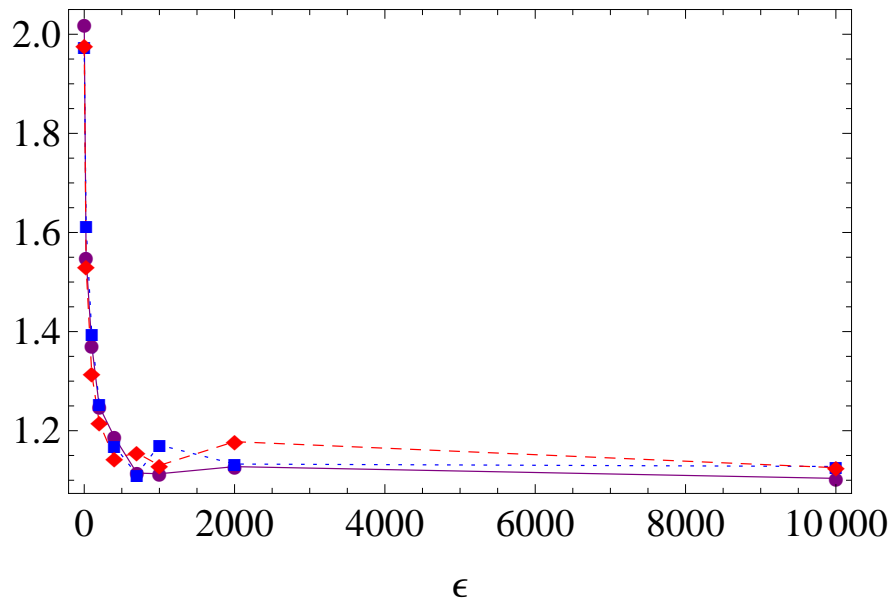


Figura 3.15: Gráfica de los exponentes de escalamiento de las fluctuaciones (secuencia de energías destendenciada) $\tilde{E}(i)$; γ (línea morada continua), β_{PS} (línea azul rayada) y β_{DFA} (línea roja punteada) en función del parámetro ϵ . Los resultados corresponden a promedios sobre el ensamble.

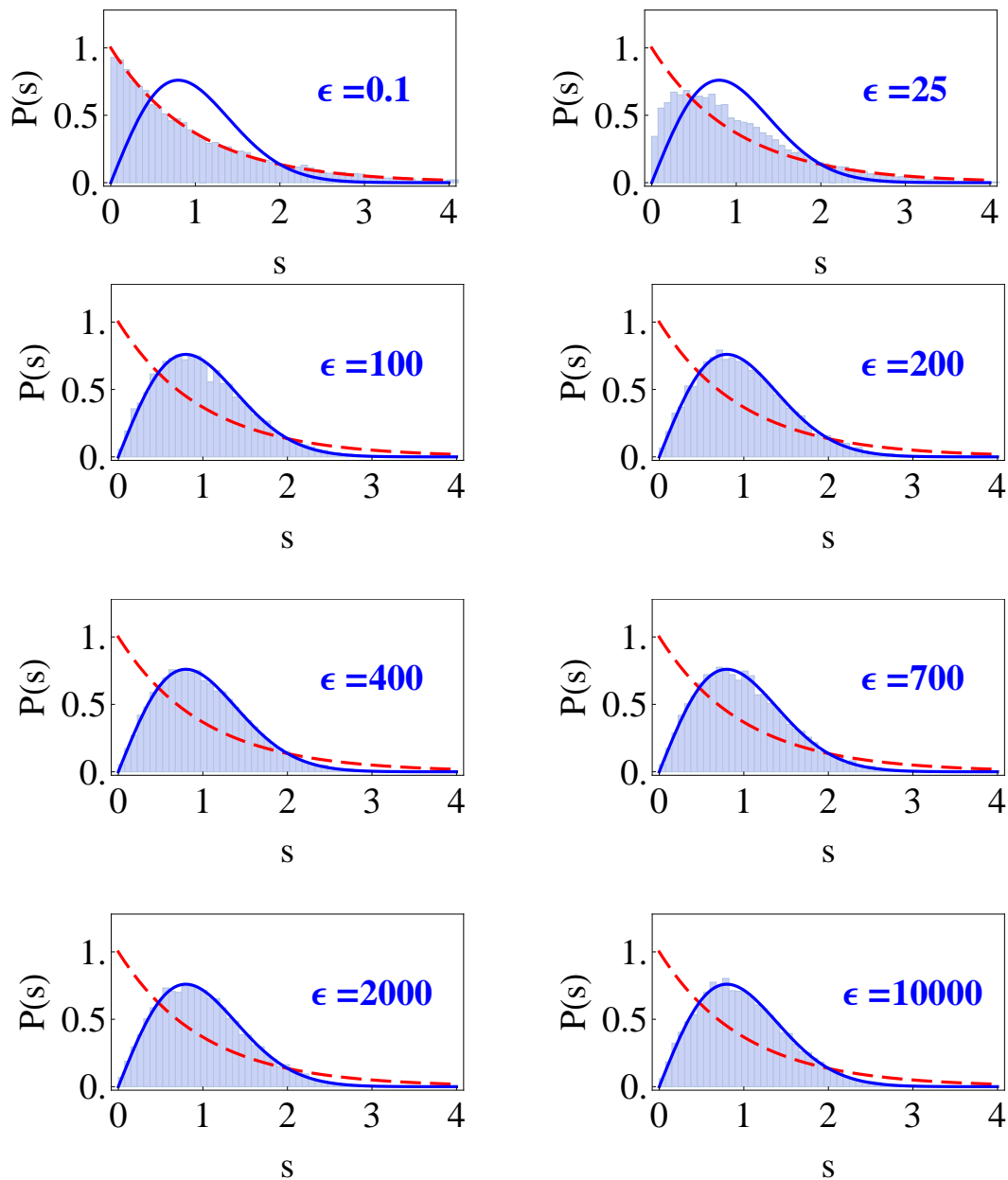


Figura 3.16: Distribución de espaciamentos del vecino más cercano (NNSD), calculada a partir de los espaciamentos destendenciados (espaciamentos de la serie de energías destendenciada) y reescalados (es decir, mapeados sobre la interpolación lineal de la tendencia encontrada al aplicar el SSA a la secuencia de energías original). Los histogramas muestran una interpolación entre la estadística de Poisson (línea roja rayada) y la estadística GOE (línea azul continua). De acuerdo a estos histogramas una interpolación entre espectros GDE y Poissonianos se logra para un valor de $\epsilon \geq 100$, sin embargo en la Figura 3.17 es mostrado que en realidad no es así. Los resultados corresponden a promedios sobre el ensamble.

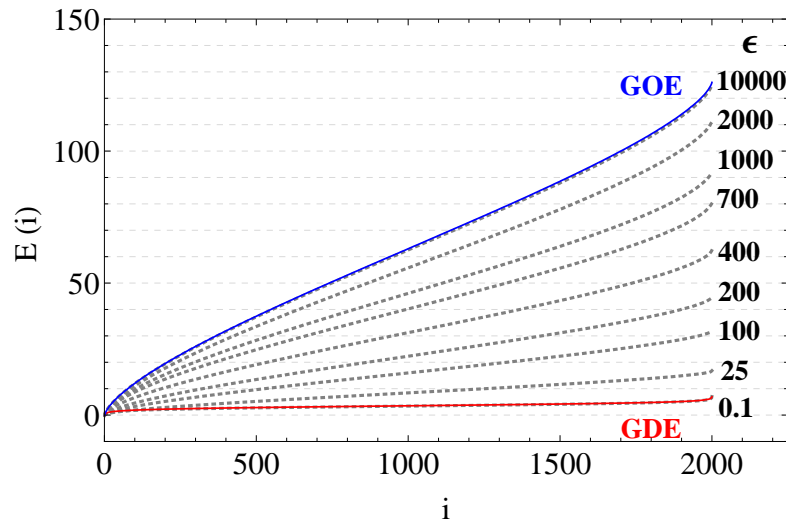


Figura 3.17: Interpolación entre espectros Poisson y GOE al variar el parámetro ϵ del modelo propuesto por T. H. Seligman et. al. [54] Una interpolación completa (de acuerdo a la Figura 2.1) desde un espectro GDE a uno GOE se logra para valores muy grande de ϵ ($\epsilon \approx 10000$).

Ensamble Beta-Hermite

El ensamble β -Hermite, definido por Dumitriu y Edelman [55], es un continuo de ensambles los cuales amplían a los ensambles Gaussianos clásicos estudiados previamente. El ensamble β -Hermite es un ensamble de familias de matrices aleatorias tridiagonales simétricas y reales. Su distribución de eigenvalores es idéntica a aquellas de el GDE, el GOE, el GUE y el GSE para $\beta = 0, 1, 2, 4$, respectivamente, por lo tanto, las características de las fluctuaciones de este ensamble coinciden con aquellas de un ensamble Poissoniano y los ensambles Gaussianos clásicos, para los correspondientes valores de β . De esta forma, al tomar valores intermedios de β , entre los mencionados anteriormente, es posible estudiar la interpolación entre los diversos ensambles. La Figura 3.18 muestra los espectros obtenidos mediante este ensamble.

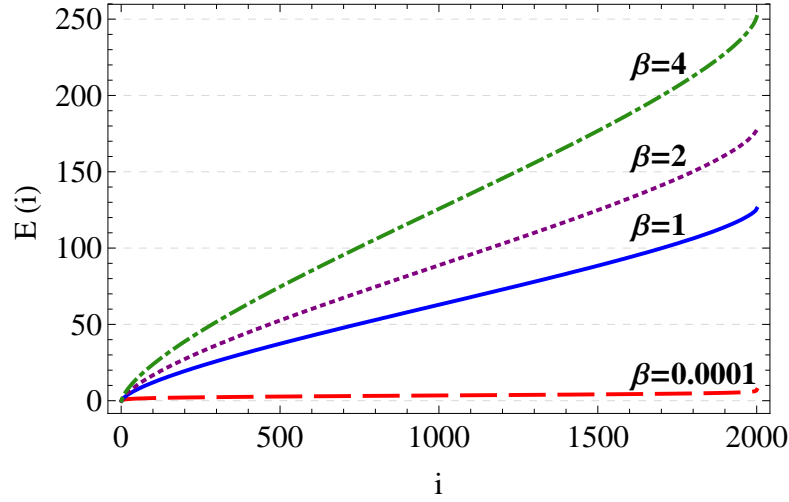


Figura 3.18: Espectros de energía de acuerdo al ensemble Beta-Hermite. Espectro Poissoniano ($\beta = 0.0001$), espectro GOE ($\beta = 1$), espectro GUE ($\beta = 2$) y espectro GSE ($\beta = 4$). Note la similitud de estos resultados con los mostrados en la Figura 2.1. Los espectros corresponden a promedios sobre un ensemble de $n = 10$ matrices.

Una matriz aleatoria de $N \times N$ del ensemble β -Hermite es definida como:

$$\mathbf{M}_{N,\beta} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12}/\sqrt{2} & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ H_{12}/\sqrt{2} & H_{22} & H_{23}/\sqrt{2} & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H_{23}/\sqrt{2} & H_{33} & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & H_{N-2,N-2} & H_{N-2,N-1}/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & H_{N-2,N-1}/\sqrt{2} & H_{N-1,N-1} & H_{N-1,N}/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & H_{N-1,N}/\sqrt{2} & H_{NN} \end{pmatrix}$$

Los $2N - 1$ elementos de matriz distintos son variables aleatorias independientes. Los elementos diagonales, H_{ii} ($i = 1, \dots, N$), son variables aleatorias con una distribución Gaussiana de promedio cero y varianza igual a uno. Los elementos fuera de la diagonal, $H_{j,j+1}$ ($j = 1, \dots, N - 1$), tienen una distribución χ con $j\beta$ grados de libertad. En algunas ocasiones se suele multiplicar la matriz anterior por algún factor de escala σ , el cual hemos tomado a ser igual a uno. A continuación mostramos los resultados de aplicar el SSA a los espectros de un ensemble de $n = 10$ matrices de dimension $N \times N$, ($N = 2000$) para diferentes valores del parámetro β .

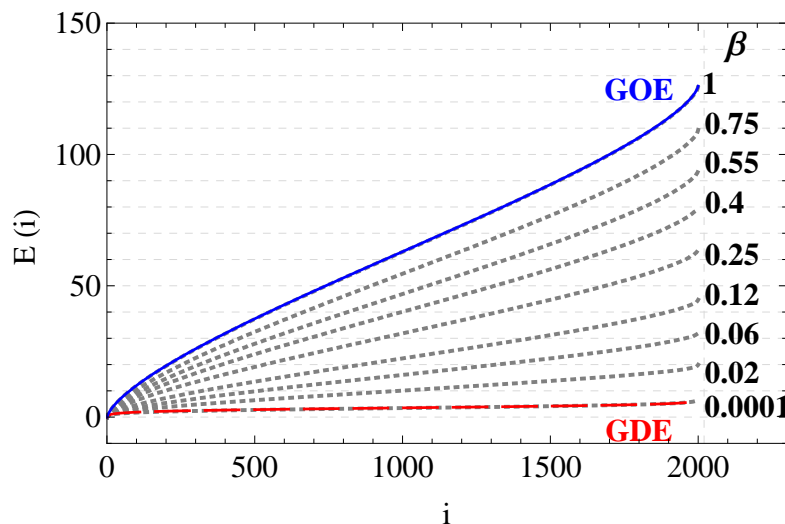


Figura 3.19: Interpolación entre los espectros Poisson y GOE al variar el parámetro β del ensamble β -Hermite propuesto por Dumitriu y Edelman [55].

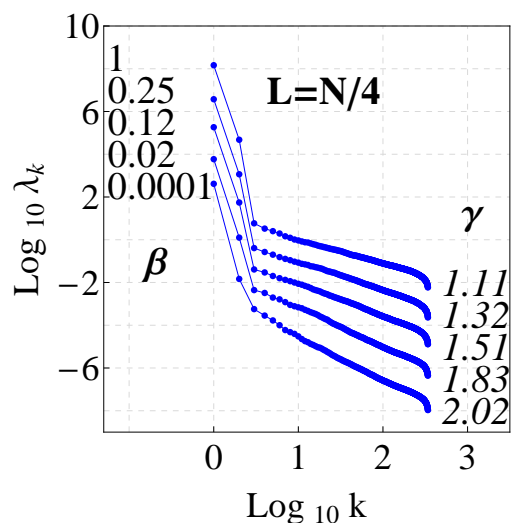


Figura 3.20: Diagramas de varianzas parciales λ_k ($k = 1, \dots, L$) obtenidos al aplicar el SSA a los espectros de un ensamble de $n = 10$ matrices de dimension $N \times N$, ($N = 2000$) para diferentes valores del parámetro β . En todos los casos λ_1 y λ_2 se apartan notablemente del resto de varianzas parciales indicando que las respectivas componentes constituyen la tendencia de la secuencia de energías $E(i)$. Cuando $k = 3, \dots, L$, λ_k sigue una ley de potencias caracterizada por el exponente γ . Al variar β conseguimos una interpolación entre la estadística de Poisson ($\gamma \approx 2$) y la estadística de GOE ($\gamma \approx 1$). Para facilitar la comparación de los resultados, los cuales corresponden a promedios sobre el ensamble, las gráficas para cada valor de β han sido recorridas verticalmente.

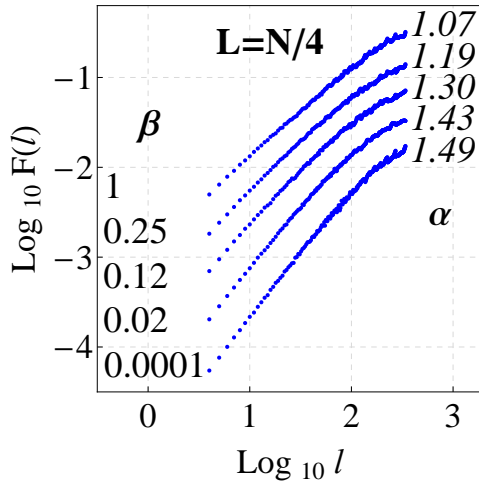


Figura 3.21: Resultados de aplicar el análisis de fluctuación destendenciada (DFA) a la serie de fluctuaciones (secuencia de energías destendenciada) $\tilde{E}(i)$ para distintos valores del parámetro β . Los valores de α varían entre $\alpha \approx 1.5$ (ruido Browniano) para $\beta = 0.0001$ y $\alpha \approx 1$ (ruido $1/f$) para $\beta = 1$. Utilizando la relación $\beta'_{DFA} = 1 - 2\alpha$, podemos ver en el Cuadro 3.2.1 que los resultados de β'_{DFA} concuerdan con los valores encontrados para γ y β'_{PS} . Para facilitar la comparación de los resultados, los cuales corresponden a promedios sobre el ensamble, las gráficas para cada valor de β han sido recorridas verticalmente.

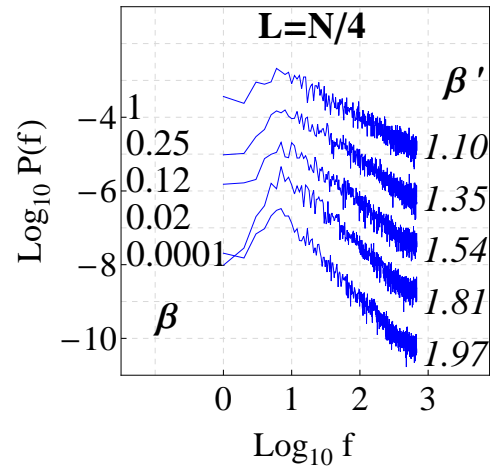


Figura 3.22: Espectro de potencias de la serie de fluctuaciones (secuencia de energías destendenciada) $\tilde{E}(i)$ en función del parámetro β . Se observa un escalamiento de ley de potencias caracterizado por β' . Los valores de β' describen una interpolación entre la estadística de Poisson ($\beta' \approx 2$) y la de GOE ($\beta' \approx 1$). Para facilitar la comparación de los resultados, los cuales corresponden a promedios sobre el ensamble, las gráficas para cada valor de β han sido recorridas verticalmente.

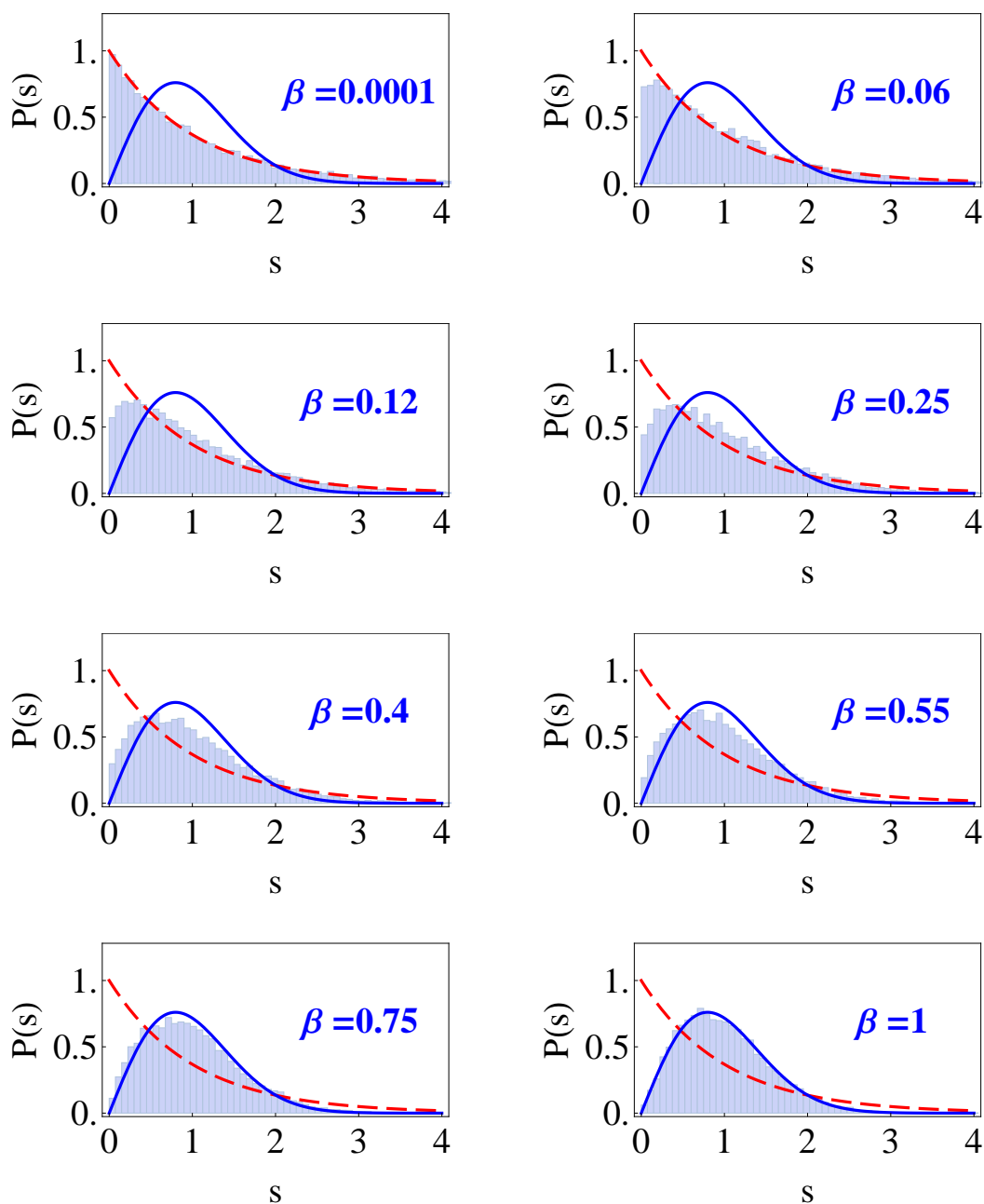


Figura 3.23: Distribución de espaciamentos del vecino más cercano (NNSD), calculada a partir de los espaciamentos desdendenciados (espaciamentos de la serie de energías desdendenciada) y reescalados (es decir, mapeados sobre la interpolación lineal de la tendencia encontrada al aplicar el SSA a la secuencia de energías original). Los histogramas muestran una interpolación entre la estadística de Poisson (línea roja rayada) y la estadística GOE (línea azul continua). Los resultados corresponden a promedios sobre el ensamble.

β	γ	β'_{PS}	β'_{DFA}
0.0001	2.02	1.97	1.97
0.02	1.82	1.81	1.85
0.06	1.63	1.63	1.72
0.12	1.51	1.53	1.60
0.25	1.31	1.35	1.38
0.4	1.22	1.19	1.29
0.55	1.15	1.15	1.23
0.75	1.13	1.11	1.20
1	1.10	1.10	1.13
1.5	1.04	1.11	1.07
2	1.02	1.06	1.03
3	1.02	1.10	1.00
4	1.00	1.08	0.99

Cuadro 3.2: Valores de los exponentes de escalamiento de las fluctuaciones (secuencia de energías destendenciada) $\tilde{E}(i)$; γ , β'_{PS} y β'_{DFA} en función del parámetro β . Los resultados corresponden a promedios sobre el ensamble. La gráfica de estos datos se muestra en la Figura 3.24.

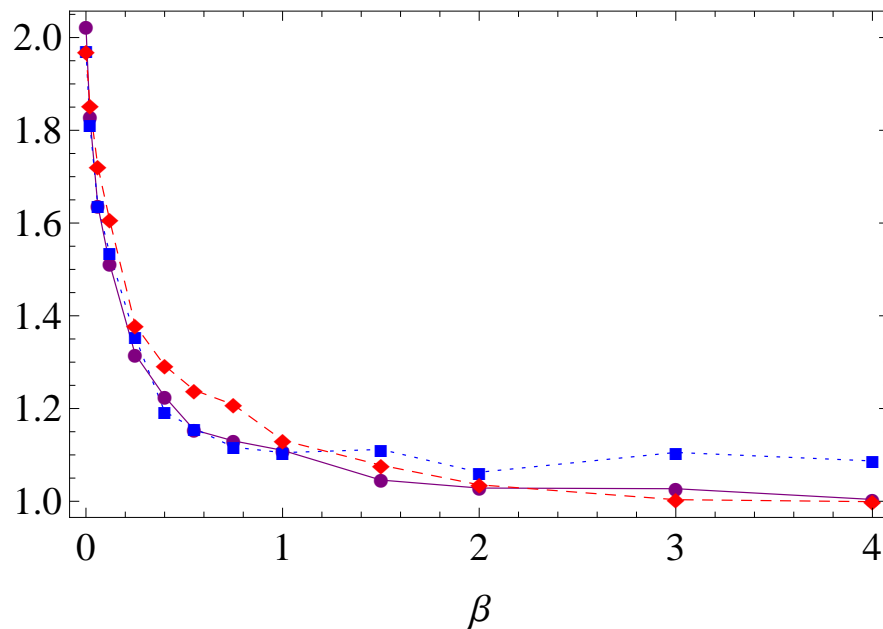


Figura 3.24: Gráfica de los exponentes de escalamiento de las fluctuaciones (secuencia de energías destendenciada) $\tilde{E}(i)$; γ (línea morada continua), β'_{PS} (línea azul rayada) y β'_{DFA} (línea roja punteada) en función del parámetro β . Los resultados corresponden a promedios sobre el ensamble.

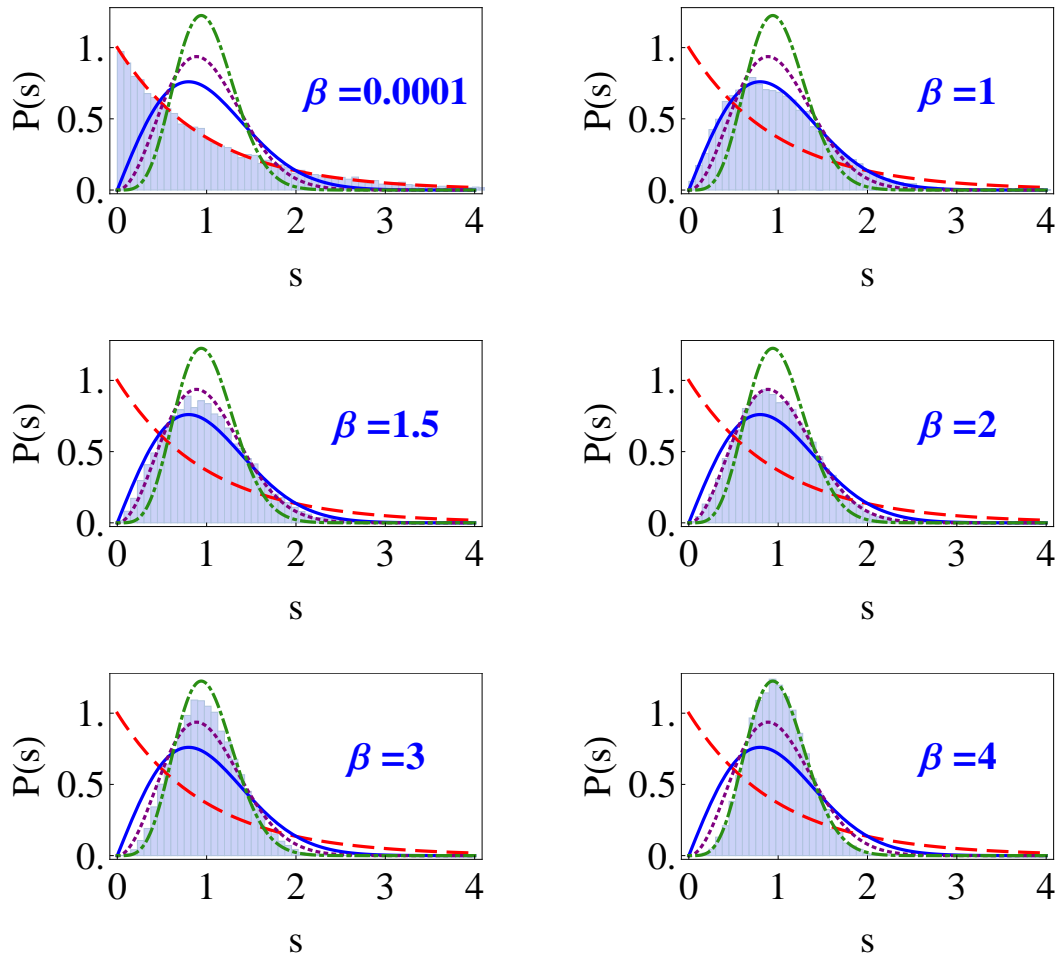


Figura 3.25: Distribución de espaciamientos del vecino más cercano (NNSD), calculada a partir de los espaciamientos destendenciados (espaciamientos de la serie de energías destendenciada) y reescalados (es decir, mapeados sobre la interpolación lineal de la tendencia encontrada al aplicar el SSA a la secuencia de energías original). Los histogramas muestran una interpolación entre la estadística de Poisson (línea roja rayada) y la estadística GOE (línea azul continua). Los resultados corresponden a promedios sobre el ensamble.

Conclusiones y perspectivas

En la presente contribución hemos sugerido interpretar un eigenespectro matricial directamente como una serie de tiempo, y aplicar técnicas del análisis de señales para llevar a cabo el procedimiento de unfolding de separación de componentes de tendencia y fluctuación en una forma adaptada a los datos. Propusimos un método particular basado en Singular Value Decomposition (SVD) con el cual este unfolding puede ser realizado. Aplicamos el método a ensambles de espectros Poisson y GOE. Ya durante el procedimiento de unfolding, una ley de potencia es obtenida para las fluctuaciones, la cual distingue entre el caso Poisson y GOE.

El empleo del método de análisis de series de tiempo adaptado a los datos SSA, también permitió separar, sin lugar a ambigüedad, el comportamiento global $\bar{E}(i)$ de las fluctuaciones locales $\tilde{E}(i)$. Los resultados no dependen de los dos parámetros del método, a saber, la dimensión de encajamiento L y el número de componentes en la tendencia n_T . Los eigenvalores del SSA (varianzas parciales), asociados a las fluctuaciones, siguen una ley de potencias que caracteriza el tipo de estadística de los espectros de excitación cuánticos. Las componentes correspondientes a estas fluctuaciones pueden ser usadas para reconstruir las medidas de fluctuación acostumbradas, lo cual corrobora que el unfolding realizado es correcto. De esta manera, el método que hemos empleado considera en una forma auto-consistente los dos aspectos del unfolding, la destendenciación y el reescalamiento.

El unfolding adaptado a los datos mostrado aquí es lo suficientemente general para ser aplicable no sólo a espectros de otros sistemas cuánticos, sino también a eigenespectros de matrices de adyacencia de redes y eigenespectros de matrices de correlación en las finanzas, el clima, EEG, etc. Estos últimos temas siendo de interés actual.

Apéndice A

Principal Component Analysis (PCA)

El análisis de componentes principales (PCA, por sus siglas en inglés) es un método estadístico no paramétrico usado en el análisis y visualización de datos complejos (multivariables), cuyo objetivo principal es identificar y extraer patrones espaciales presentes en los mismos, así como también reducir su dimensión. El PCA ha sido aplicado en diversos campos tales como el reconocimiento facial, la neurociencia, la compresión de imágenes, entre otros.

La forma en que el PCA cumple su objetivo es mediante la búsqueda de una nueva base para representar los datos, la cual es una combinación *lineal* de la base original, es decir, una rotación de la misma. Puesto que el PCA asume que las direcciones que contienen la dinámica de interés, son aquellas con las varianzas más grandes, esta nueva base se construye con los eigenvectores de la matriz de covarianza del conjunto de datos, ordenados en función de sus eigenvalores, del más grande al más pequeño. A estos eigenvectores se les conoce como *componentes principales*. Los eigenvalores son iguales a la varianza de los datos a lo largo de las componentes principales. Una vez conocidas las componentes principales, el PCA simplifica las relaciones entre los datos al reexpresarlos en términos de estas (las componentes principales forman una nueva base sobre la cual se proyectan los datos) y adicionalmente, si así es requerido, reduce la dimensión de los mismos al seleccionar solamente algunas de las componentes principales, generalmente aquellas con las varianzas más grandes, para su representación. Es así como el PCA permite analizar y simplificar conjuntos de datos complejos. A continuación se describen los detalles de aplicar el PCA a un conjunto de datos bidimensional.

Supongamos que en determinado sistema se efectúan diez mediciones de dos diferentes tipos de variables, x_1 y x_2 . Con los resultados de estas mediciones se forma una matriz \mathbf{X} de dimensiones 2×10 , tal como se muestra en la ecuación (A.1), donde cada fila corresponde a todas las mediciones de un cierto tipo particular o variable y cada columna corresponde con los resultados obtenidos en una cierta prueba experimental, o un determinado momento en el tiempo, para cada una de las variables. La gráfica de estos datos se muestra en la Figura A.1.

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 0 & 0.39 & 0.81 & 1.20 & 1.36 & 1.57 & 1.70 & 1.77 & 1.99 & 2.05 \\ 0 & 0.91 & 1.17 & 1.46 & 2.09 & 2.50 & 2.59 & 2.79 & 2.89 & 3.18 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

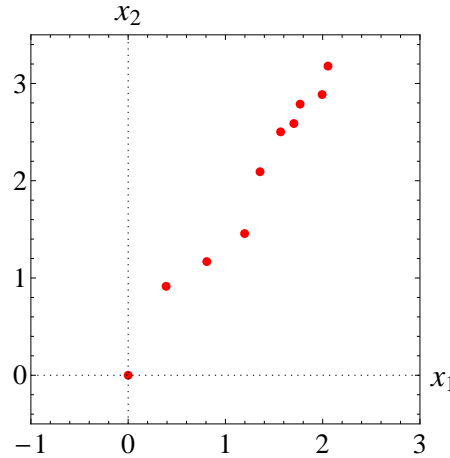


Figura A.1: Gráfica del conjunto de datos \mathbf{X} , ecuación (A.1). Los datos corresponden a diez mediciones hipotéticas efectuadas sobre dos variables diferentes x_1 y x_2 , de un cierto sistema.

Los pasos para efectuar el PCA del conjunto de datos \mathbf{X} son:

Paso 1. Se calcula la matriz de covarianza de \mathbf{X} . La covarianza mide el grado de relación lineal que existe entre dos variables. Si se calcula la covarianza de una variable consigo misma se obtiene su varianza. En general, la covarianza entre dos variables x_1 y x_2 , donde cada una de ellas cuenta con n elementos, esta dada por

$$\text{cov}(x_1, x_2) = \frac{\sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2)}{n - 1} \quad (\text{A.2})$$

donde x_{ij} , para $i = 1, 2$ es el j -ésimo elemento de la variable i , mientras que \bar{x}_i es su correspondiente valor promedio. Si el valor de la covarianza es positivo significa que las variables están positivamente correlacionadas, es decir, ambas variables se incrementan o decrecientan al mismo tiempo. Si el valor de la covarianza es negativo significa que las variables están negativamente correlacionadas, es decir, cuando una variable aumenta la otra disminuye. En cualesquiera de estos dos casos es posible predecir, hasta cierto grado, el valor de una variable a partir de la otra, lo cual indica que existe redundancia en nuestras mediciones. Si la covarianza es igual a cero significa que las variables no están correlacionadas, es decir, las variables son independientes y, por lo tanto, no es posible predecir una a partir de la otra.

Se pueden disponer los valores obtenidos al calcular la covarianza entre las diferentes variables en un arreglo matricial conocido como matriz de covarianza, \mathbf{C} . Los valores en la diagonal de esta matriz serán iguales al valor de la varianza de cada una de las variables. Dicha matriz es cuadrada y además simétrica puesto que $cov(x_1, x_2) = cov(x_2, x_1)$. En el ejemplo, puesto que el conjunto de datos es bidimensional, la matriz de covarianza de \mathbf{X} , ecuación (A.1), denotada como $\mathbf{C}_{\mathbf{X}}$, es una matriz de 2×2 , dada por

$$\mathbf{C}_{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} cov(x_1, x_1) & cov(x_1, x_2) \\ cov(x_2, x_1) & cov(x_2, x_2) \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Efectuando las operaciones correspondientes se obtiene

$$\mathbf{C}_{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} 0.47 & 0.70 \\ 0.70 & 1.06 \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

Paso 2. Se calculan los eigenvalores λ_i , y los eigenvectores ortonormales $\hat{\mathbf{p}}_i$, de la matriz de covarianza $\mathbf{C}_{\mathbf{X}}$ ¹, para $i = 1, 2$. Los eigenvectores $\hat{\mathbf{p}}_i$ son conocidos como las *componentes principales* (PC's, por sus siglas en inglés) del conjunto de datos \mathbf{X} . Se ordenan las componentes principales $\hat{\mathbf{p}}_i$ de acuerdo a la magnitud de su correspondiente eigenvalor λ_i (varianza), del más grande al más pequeño, y los disponemos como las filas de una matriz \mathbf{P} ². De esta manera, la primera fila de la matriz \mathbf{P} será la componente principal $\hat{\mathbf{p}}_1$ cuya varianza λ_1 sea aquella con el valor más grande y así sucesivamente. Los eigenvalores (varianzas) de $\mathbf{C}_{\mathbf{X}}$, son: $\lambda_1 = 1.526$ y $\lambda_2 = 0.009$, mientras que la matriz \mathbf{P} está dada por

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0.55 & 0.83 \\ -0.83 & 0.55 \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

Como se puede ver en la Figura A.2, las componentes principales $\hat{\mathbf{p}}_i$ proporcionan información acerca de los patrones espaciales presentes en el conjunto de datos \mathbf{X} , al extraer las direcciones que lo caracterizan, es decir, las direcciones donde la varianza de los datos es máxima. Por ejemplo, note que la varianza en \mathbf{X} , se maximiza a lo largo de la dirección de la componente principal $\hat{\mathbf{p}}_1$, siendo ésta la relación más significativa entre las variables del conjunto de datos.

Paso 3. Se obtiene una nueva representación del conjunto de datos \mathbf{X} , al expresarlo en términos de las direcciones principales $\hat{\mathbf{p}}_i$, es decir, se calcula $\mathbf{Y} = \mathbf{P}\mathbf{X}$. En el ejemplo

¹ $\mathbf{C}_{\mathbf{X}}$ es una matriz positiva definida y por lo tanto sus eigenvalores son positivos y sus eigenvectores son ortogonales.

²Note que la matriz \mathbf{P} es ortogonal puesto que su inversa \mathbf{P}^{-1} , es igual a su transpuesta \mathbf{P}^T , tal que $\mathbf{P}^T\mathbf{P} = \mathbf{P}\mathbf{P}^T = \mathbf{I}$, donde \mathbf{I} , es la matriz identidad.

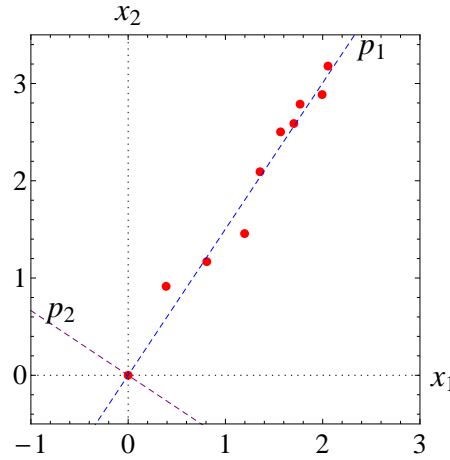


Figura A.2: Gráfica del conjunto de datos \mathbf{X} , ecuación (A.1), junto con las direcciones de las componentes principales $\hat{\mathbf{p}}_1$ y $\hat{\mathbf{p}}_2$. La dirección de $\hat{\mathbf{p}}_1$ corresponde a aquella donde los datos exhiben la máxima varianza, $\lambda_1 = 1.526$, mientras que la varianza correspondiente a la dirección de $\hat{\mathbf{p}}_2$ es $\lambda_2 = 0.09$.

estudiado se tiene

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 0 & 0.98 & 1.42 & 1.88 & 2.49 & 2.95 & 3.10 & 3.30 & 3.51 & 3.78 \\ 0 & 0.18 & -0.03 & -0.19 & 0.03 & 0.08 & 0.02 & 0.07 & -0.06 & 0.05 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

La gráfica de este nuevo conjunto de datos es mostrada en la Figura A.3. Note que la matriz de covarianza de \mathbf{Y} , es una matriz diagonal, $\mathbf{C}_Y = \mathbf{P}\mathbf{C}_X\mathbf{P}^T$, puesto que la covarianza entre cada una de las nuevas variables es igual a cero, y por lo tanto, el nuevo conjunto de datos \mathbf{Y} , es no correlacionado. Los valores en la diagonal de \mathbf{C}_Y corresponden con los de las varianzas encontradas anteriormente y así se obtiene que

$$\mathbf{C}_Y = \begin{pmatrix} 1.526 & 0 \\ 0 & 0.009 \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

Hasta aquí, no se ha hecho más que un cambio de base, donde las componentes principales $\hat{\mathbf{p}}_i$, constituyen el nuevo conjunto de vectores ortonormales sobre el cual se proyecta el conjunto de datos \mathbf{X} . Sin embargo, ahora también se puede reducir las dimensiones de \mathbf{X} , al ignorar las componentes principales menos significantes, es decir, aquellas cuyas varianzas sean muy pequeñas en comparación con el resto. El número de componentes principales que se decida conservar en \mathbf{P} será igual a la dimensión del nuevo conjunto de datos resultante. Típicamente la elección de las componentes principales $\hat{\mathbf{p}}_i$ significantes está basada sobre la varianza relativa de las mismas. Siguiendo con el ejemplo, suponga que solamente se desea conservar a la primer componente principal, entonces \mathbf{P} será igual al vector fila \mathbf{p}_1 .

$$\mathbf{P} = (0.55 \quad 0.83) \quad (\text{A.8})$$

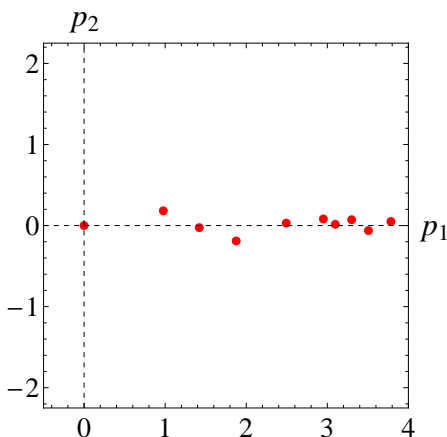


Figura A.3: Gráfica de $\mathbf{Y} = \mathbf{P}\mathbf{X}$, ecuación (A.6). \mathbf{P} actúa como una rotación la cual alinea al eje x_1 con el eje de máxima varianza p_1 .

En este caso, al efectuar $\mathbf{Y} = \mathbf{P}\mathbf{X}$, se obtiene el siguiente conjunto de datos unidimensional

$$\mathbf{Y} = (0 \quad 0.98 \quad 1.42 \quad 1.88 \quad 2.49 \quad 2.95 \quad 3.10 \quad 3.30 \quad 3.51 \quad 3.78) \quad (\text{A.9})$$

La Figura A.4 muestra la gráfica de \mathbf{Y} . De esta forma no solamente se ha reexpresado el conjunto de datos original \mathbf{X} en términos de una nueva base, la cual obtenemos intrínsecamente de los datos al identificar las direcciones de máxima variación de éstos, sino que además, la cuantificación de la importancia de tales direcciones nos ha permitido reducir la dimensión de los datos. Si bien el ejemplo ilustrado aquí es muy sencillo, es en el estudio de conjuntos de datos de dimensiones mucho más grandes donde el PCA muestra ser una herramienta bastante útil para su caracterización.

En algunas aplicaciones del PCA, tales como la compresión de datos, es imprescindible obtener de nuevo el conjunto de datos \mathbf{X} . Para conseguir esto simplemente se debe multiplicar la inversa de \mathbf{P} por el nuevo conjunto de datos \mathbf{Y} que se ha obtenido. Puesto que \mathbf{P} es ortogonal, y por lo tanto $\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P}^T$, se tiene

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{P}^T \mathbf{Y} \quad (\text{A.10})$$

donde $\tilde{\mathbf{X}}$ es un nuevo conjunto de datos, el cual depende del número de componentes principales que se haya elegido conservar. En el caso de que se decida conservar todas las componentes principales para formar la matriz \mathbf{P} , al aplicar la transformación inversa, ecuación (A.10), simplemente se obtendrá de nuevo a \mathbf{X} . Si solo se conservan algunas componentes entonces el resultado será un nuevo conjunto de datos que se aproximará al original tanto como número de componentes se haya elegido conservar. Siguiendo con el ejemplo, si solamente se conserva la

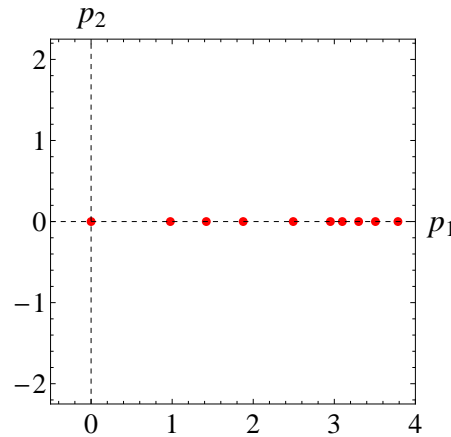


Figura A.4: Gráfica de $Y = PX$, ecuación (A.9). La matriz P es igual al vector fila \hat{u}_1 , es decir, se ha proyectado X solo a lo largo de la componente principal con la varianza más grande y además reducido su dimensión.

primer componente principal para formar la matriz P , como es el caso en la ecuación (A.8), entonces, al aplicar (A.10), se obtiene

$$\tilde{X} = \begin{pmatrix} -1.6 & -1.0 & -0.7 & -0.2 & 0.0 & 0.2 & 0.4 & 0.7 & 1.0 & 1.2 \\ -1.6 & -1.0 & -0.7 & -0.2 & 0.0 & 0.2 & 0.4 & 0.7 & 1.0 & 1.2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

La gráfica de \tilde{X} se muestra en la figura A.5. Comparando este resultado con la Figura A.2 es posible notar como únicamente la variación a lo largo de la componente principal p_1 ha sido preservada, mientras que la variación a lo largo de p_2 ha sido eliminada. Así, al excluir algunas componentes principales se pierde información de los datos originales, pero si las correspondientes varianzas son relativamente pequeñas, la información pérdida entonces no es demasiada. En su lugar, se consigue reducir la dimensión de los datos y con ello estar en posibilidades de visualizar más claramente las relaciones entre los mismos.

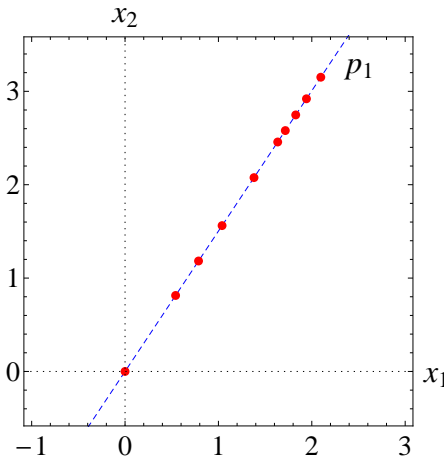


Figura A.5: Gráfica de $\tilde{\mathbf{X}}$, ecuación (A.11). En la matriz \mathbf{P} , ecuación (A.5), de la reconstrucción dada por la ecuación (A.10), hemos conservado solo a la primer componente principal $\hat{\mathbf{p}}_1$, y de esta forma preservado la varianza de los datos \mathbf{X} , ecuación (A.1), únicamente a lo largo de esta dirección.

La relación entre la descomposición de valores singulares (SVD) y el análisis de componentes principales (PCA) es muy cercana, puesto que es posible emplear SVD para llevar a cabo PCA. Para calcular PCA empleando SVD es necesario primero restar a cada una de las m variables del conjunto de datos \mathbf{X} , ecuación (A.1), su promedio y entonces se procede a efectuar la descomposición de valores singulares de este nuevo conjunto de datos, al cual denominaremos $\bar{\mathbf{X}}$. Note que, puesto que se ha restado el promedio a cada una de las variables en \mathbf{X} , el producto $\bar{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{X}}^T$, salvo el factor $(\frac{1}{n-1})$, corresponde a la matriz de covarianza de \mathbf{X} , $\mathbf{C}_{\mathbf{X}}$. De esta manera, los eigenvectores $\hat{\mathbf{u}}_k$ constituyen las componentes principales de \mathbf{X} , y los eigenvalores $\lambda_k = \sigma_k^2$ representan la varianza de los datos a lo largo de las direcciones definidas por ellas. Por lo tanto, la matriz \mathbf{U} es igual a la transpuesta de la matriz \mathbf{P} . Así, una nueva representación de \mathbf{X} se obtiene al calcular

$$\mathbf{Y} = \mathbf{U}^T \mathbf{X} \quad (\text{A.12})$$

Bibliografía

- [1] Bohigas, O., M. J. Giannoni y C. Schmit: *Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws*. Phys. Rev. Lett., 52(1):1–4, 1983.
- [2] Kota, V. K. B.: *Embedded random matrix ensembles for complexity and chaos in finite interacting particle systems*. Phys. Rep., 347:223–288, 2001.
- [3] Papenbrock, T. y H. A. Weidenmüller: *Random Matrices and Chaos in Nuclear Spectra*. Rev. Mod. Phys., 79:997–1013, 2007.
- [4] Weidenmüller, H. A. y G. E. Mitchell: *Random matrices and chaos in nuclear physics: Nuclear structure*. Rev. Mod. Phys., 81:539–589, 2009.
- [5] Haake, Fritz: *Quantum signatures of chaos*. Springer, Heidelberg Dordrecht London New York, tercera edición, 2010.
- [6] Gómez, J.M.G., K. Kar, V. K. B. Kota, R. A. Molina, A. Relaño y J. Retamosa: *Many-body quantum chaos: Recent developments and applications to nuclei*. Phys. Rep., 499(4–5):103–226, 2011.
- [7] Brody, T. A., J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey y S. S. M. Wong: *Random-matrix physics: spectrum and strength fluctuations*. Rev. Mod. Phys., 53(3):385–480, 1981.
- [8] Gómez, J. M. G., R. A. Molina, A. Relaño y J. Retamosa: *Misleading signatures of quantum chaos*. Phys. Rev. E, 66:036209, 2002.
- [9] Relaño, A., J. M. G. Gómez, R. A. Molina y J. Retamosa: *Quantum chaos and 1/f noise*. Phys. Rev. Lett., 89(24):244101, 2002.
- [10] Santhanam, M. S., Jayendra N. Bandyopadhyay y Dilip Angom: *Quantum spectrum as a time series: fluctuation measures*. Phys. Rev. E, 73:015201(R), 2006.

- [11] Landa, E., I. Morales, , R. Fossion, P. Stránský, V. Velázquez, J.C. López Vieyra y A. Frank: *Criticality and long-range correlations in time series in classical and quantum systems*. Phys. Rev. E, 84:016224, 2011.
- [12] Morales, Irving O., E. Landa, P. Stránský y A. Frank: *Improved unfolding by detrending of statistical fluctuations in quantum spectra*. Phys. Rev. E, 84:016203, 2011.
- [13] Elsner, James B. y Anastasios A. Tsonis: *Singular Spectrum Analysis: A New Tool in Time Series Analysis*. Plenum Press, New York, 1996.
- [14] Goldyandina, Nina, Vladimir Nekrutkin y Anatoly Zhigljavsky: *Analysis of time series structure: SSA and related techniques*. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, London, New York, Washington DC, 2001.
- [15] Shumway, Robert H. y David S. Stoffer: *Time series analysis and its applications*. Springer, New York, tercera edición, 2011.
- [16] Gao, Jianbo, Yinhe Cao, Wen wen Tung y Jing Hu: *Multiscale analysis of complex time series: integration of chaos and random fractal theory, and beyond*. Wiley, New Jersey, primera edición, 2007.
- [17] Peña, Daniel, George C. Tiao y Ruey S. Tsay: *A course in time series analysis*. Wiley, New Jersey, primera edición, 2001.
- [18] Chatfield, Chris: *The analysis of time series: an introduction*. Chapman & Hall/CRC, UK, quinta edición, 1995.
- [19] Brockwell, Peter J. y Richard A. Davis: *Time series: theory and methods*. Springer, New York, segunda edición, 2006.
- [20] Ashkenazy, Yosef, Shlomo Havlin, Plamen Ch. Ivanov, Chung K. Peng, Verena Schulte-Frohlinde y H. Eugene Stanley: *Magnitude and sign scaling in power-law correlated time series*. Physica A, 323:19–41, 2003.
- [21] Koopmans, Lambert H.: *The spectral analysis of time series*. Academic Press, San Diego, California, segunda edición, 1995.
- [22] Brillinger, David R.: *Time series: data analysis and theory*. SIAM, EUA, tercera edición, 2001.
- [23] Priestley, M.B.: *Spectral analysis and time series*. Academic Press, New York, primera edición, 1981.

- [24] Bloomfield, Peter: *Fourier analysis of time series*. Wiley, New York, segunda edición, 2000.
- [25] Peng, C. K., J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Havlin, H. E. Stanley y A. L. Goldberger: *Long-Range Anticorrelations and Non-Gaussian Behavior of the Heartbeat*. Phys. Rev. Lett., 70:1343–1346, 1993.
- [26] Peng, C. K., S. Havlin, H. E. Stanley y A. L. Goldberger: *Quantification of scaling exponents and crossover phenomena in nonstationary heartbeat time series*. Chaos, 5:82–87, 1995.
- [27] JM, Hausdorff, Zemaný L, Peng C-K y Goldberger AL: *Maturation of gait dynamics: stride-to-stride variability and its temporal organization in children*. J Appl Physiol, 86:1040–1047, 1999.
- [28] C.-K-Peng, Joseph E. Mietus, Yanhui Liu, Christine Lee, Jeffrey M. Hausdorff, H. Eugene Stanley, Ary L. Goldberger y Lewis A. Lipsitz: *Quantifying fractal dynamics of human respiration: age and gender effects*. Annals of Biomedical Engineering, 30:683–692, 2002.
- [29] Landa, E., I. Morales, C. Hernández, J.C. López Vieyra y A. Frank: *Scale invariance and criticality in nuclear spectra*. Rev. Mex. de Fís., 54:48–55, 2008.
- [30] Klema, V. y A.J. Laub: *The singular value decomposition: Its computation and some applications*. Automatic Control, IEEE Transactions, 25:164–176, 1980.
- [31] Wall, Michael E., Andreas Rechtsteiner y Luis M. Rocha: *A practical approach to microarray data analysis*. Springer US, EUA, primera edición, 2003.
- [32] Huang, Norden E., Zheng Shen, Steven R. Long, Manli C. Wu, Hsing H. Shih, Quanan Zheng, Nai Chyuan Yen, Chi Chao Tung y Henry H. Liu: *The empirical mode decomposition and the Hilbert spectrum for nonlinear and non-stationary time series analysis*. Proc. R. Soc. Lond. A, 454:903–995, 1998.
- [33] Schlesinger, Michael E. y Navin Ramankutty: *An oscillation in the global climate system of period 65-70 years*. Nature, 367:723–726, 1994.
- [34] Kondrashov, D. y M. Ghil: *Spatio-temporal filling of missing points in geophysical data sets*. Nonlinear Processes in Geophysics, 13:151–159, 2006.
- [35] Mamou, Jonathan y Ernest J. Feleppa: *Singular spectrum analysis applied to ultrasonic detection and imaging of brachytherapy seeds*. Journal of the Acoustical Society of America, 121:1790–1801, 2007.

- [36] Watari, S.: *Separation of periodic, chaotic, and random components in solar activity*. Solar Physics, 168:413–422, 1996.
- [37] Hassani, Hossein, Abdol S. Soofi y Anatoly A. Zhigljavsky: *Predicting daily exchange rate with singular spectrum analysis*. Nonlinear Analysis: Real World Applications, 11:2023–2034, 2010.
- [38] Brohan, P., J. J. Kennedy, I. Harris, S. F. B. Tett y P. D. Jones: *Uncertainty estimates in regional and global observed temperature changes: a new dataset from 1850*. J. Geophysical Research, 111, 2006.
- [39] Porter, C. E.: *Statistical Theories of Spectra: Fluctuations*. Academic Press, New York, 1965.
- [40] Berry, M. V. y M. Tabor: *Level clustering in the regular spectrum*. Proc. R. Soc. Lond. A., 356:375–394, 1977.
- [41] Jalan, S.: *Spectral analysis of deformed random networks*. Phys. Rev. E, 80:046101, 2009.
- [42] Luo, F, J Zhong, Y Yang y J Zhou: *Application of random matrix theory to microarray data for discovering functional gene modules*. Phys. Rev. E, 73:031924, 2006.
- [43] Bin, Y., L. Hui-jun y M. Xiao-ping: *$1/f^\alpha$ noise in spectral fluctuations of complex networks*. Physica A, 389:5328–5331, 2010.
- [44] Laloux, L., P. Cizeau, J. P. Bouchaud y M. Potters: *Noise Dressing of Financial Correlation Matrices*. Phys. Rev. Lett, 83:1467–1470, 1999.
- [45] Santhanam, M. S. y P. K. Patra: *Statistics of atmospheric correlations*. Phys. Rev. E, 64:016102, 2001.
- [46] P., Seba: *Random matrix analysis of human EEG data*. Phys. Rev. Lett., 91:198104, 2003.
- [47] Mehta, M. L.: *Random Matrices*. Academic Press, New York, segunda edición, 1991.
- [48] McDonald, S. W. y A. N. Kaufman: *Spectrum and eigenfunctions for a hamiltonian with stochastic trajectories*. Phys. Rev Lett, 42:1189, 1979.
- [49] Casati, G., I. Guarneri y F. Valz-Gris: *On the connection between quantization of non-integrable systems and statistital theory of spectra*. Lettere al Nuovo Cimento, 28:279, 1980.
- [50] Andersen, A., A. D. Jackson y H. J. Pedersen. *Nucl. Phys. A*, 650:213, 1999.

- [51] Jackson, A. D., C. Mejia-Monasterio, T. Rupp, M. Saltzer y T. Wilke. *Nucl. Phys. A*, 687:405, 2001.
- [52] Wu, Z., N. E. Huang y S. R. Long et al. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 104:14889, 2007.
- [53] Faleiro, E., J. M. G. Gómez, R. A. Molina, L. Muñoz, A. Relaño y J. Retamosa. *Phys. Rev. Lett.*, 93:244101, 2004.
- [54] Seligman, T. H., J. J. M. Verbaarschot y M.R. Zirnbauer: *Quantum spectra and transition from regular to chaotic classical motion*. *Phys. Rev. Lett.*, 53:215–217, 1984.
- [55] Dumitrio, I. y A. Edelman. *J. Math. Phys.*, 43:5830, 2002.