



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

INSTITUTO DE MATEMÁTICAS, UNIDAD CUERNAVACA

CÁLCULO DE INVARIANTES TOPOLÓGICOS

R E P O R T E

CONCERNIENTE AL

II VERANO DE LA INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA

EDGAR AGUSTÍN LOZANO VIESCA

ASESORES:

Dr. CARLOS VILLEGAS BLAS

Dr. HERMANN SCHULZ-BALDES





## RESUMEN

En el presente reporte se presenta la investigación realizada durante el II Verano de la Investigación Científica, llevado a cabo en el Instituto de Matemáticas de la UNAM, Unidad Cuernavaca del 26 de junio al 11 de agosto de 2017. También se detallan los resultados que se obtuvieron como producto de este estudio.

La investigación desarrollada se enfocó al área de Matemáticas de la Física, trabajando principalmente con Teoría de Aislantes Topológicos. Inicialmente se adquirieron los conocimientos necesarios para abordar la rama antes mencionada.

Durante la investigación logramos entender y desarrollar un método eficiente para el cálculo numérico de invariantes topológicos, además de sentar las bases para poder estudiar y modelar diversos fenómenos.

Doy las gracias por al apoyo recibido en el Instituto, tanto de los organizadores como del personal con el que estuve en contacto, especialmente el de los asesores con los que estuve colaborando durante la estancia, el Dr. Carlos Villegas Blas y el Dr. Hermann Schulz-Baldes. Agradezco el tiempo que me dedicaron, así como los conocimientos que me transmitieron y la paciencia que mostraron. Agradezco también al *Programa para un Avance Global e Integrado de la Matemática Mexicana, proyecto FORDECyT, clave 265667*.

# Contenido

<b>1</b>	<b>Invariantes</b>	<b>3</b>
1.1	Invariantes Topológicos . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Teoremas de Índice</b>	<b>4</b>
2.1	Operador de Fredholm . . . . .	5
<b>3</b>	<b>Operador de Bott</b>	<b>6</b>
3.1	Teorema Schulz-Loring . . . . .	7
<b>4</b>	<b>Cálculo Numérico de Signatura</b>	<b>7</b>
4.1	Algoritmo de Cholesky . . . . .	9
<b>5</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>11</b>

# 1 Invariantes

En Matemáticas, la noción de invariancia hace referencia a la propiedad que posee una entidad y que le permite permanecer inmutable ante la aplicación de cierta transformación. Se dice que un objeto es invariante bajo un conjunto de transformaciones si y sólo si la entidad o propiedad resultante al aplicar las transformaciones es exactamente la misma que la original, es decir, la transformación no ocasiona ningún cambio.

Algunos sencillos ejemplos de invariancia se muestran a continuación:

1. El área de un triángulo al rotarlo.
2. Los ángulos de un cuadrado al incrementar el tamaño de este.
3. El signo de un número real al multiplicarlo o dividirlo por un número positivo.

En estos casos mencionados anteriormente se dice que:

1. El área de un triángulo es invariante bajo rotaciones.
2. Los ángulos de un cuadrado se mantienen invariantes bajo homotecias.
3. El signo de un número real es invariante tanto bajo multiplicación como bajo división por números positivos.

Otro ejemplo interesante se presenta cuando se preservan distancias. En dicho caso la transformación en cuestión es llamada isometría. Por lo que (como se observa de manera obvia en la definición de isometría) la distancia es invariante bajo isometrías.

## 1.1 Invariantes Topológicos

Algunos autores definen la topología como el estudio de aquellas propiedades del espacio que permanecen invariables cuando el espacio se somete a homeomorfismos. Llamamos a estas propiedades invariantes topológicos [2].

**Definición 1** Sea  $\mathcal{P}$  una propiedad del espacio topológico  $(\mathcal{X}, \mathcal{G})$ .  $\mathcal{P}$  es un invariante topológico si y sólo si dados un espacio topológico  $(\mathcal{Y}, \mathcal{H})$  y un homeomorfismo  $h: (\mathcal{X}, \mathcal{G}) \rightarrow (\mathcal{Y}, \mathcal{H})$  se tiene que  $\mathcal{Y}$  satisface  $\mathcal{P}$ .

En pocas palabras, diremos que cierta propiedad se considera invariante topológico siempre y cuando esta sea invariante bajo homeomorfismo.

Sea  $f$  una función que va de un espacio topológico a otro espacio topológico. Llamaremos a  $f$  un *homeomorfismo* si y sólo si  $f$  es una biyección y además, tanto  $f$  como su inversa  $f^{-1}$  son funciones continuas.

Un ejemplo de invariante topológico es el denominado *número de rotación* o *índice de una curva cerrada*, el cual representa el número de vueltas que la curva (cerrada) describe alrededor de un punto (que no pertenece a la curva). Las vueltas en sentido horario se cuentan como negativas y las que son en sentido antihorario como positivas.

**Ejemplo 1** Tomando una curva cerrada  $\gamma$  y un punto  $z_0 \notin \text{Im}(\gamma)$ , se define el número de rotación de la curva como:

$$\#Rot(\gamma, z_0) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{dz}{z - z_0} \in \mathbb{Z} \quad (1)$$

teniendo que dicho índice de la curva se mantiene invariante bajo deformaciones continuas (siempre que la curva no atraviese el punto  $z_0$ ). Suele decirse que se tiene invariancia bajo homotopía.

**Ejemplo 2** Sea  $f : [-\pi, \pi) \rightarrow \mathbb{C} \setminus \{0\}$  una curva cerrada diferenciable, tenemos que

$$\#Rot(f) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{f'(t)}{f(t)} dt \in \mathbb{Z}. \quad (2)$$

Si una aplicación continua (de un espacio topológico en otro) puede deformarse continuamente en otra (del mismo tipo), se dice que tales aplicaciones son *homotópicas*.

## 2 Teoremas de Índice

El área enfocada al estudio de los teoremas de índice surgió hace tiempo y ha tenido un gran auge últimamente. ¡así aún, algunos de los premios más importantes en Matemáticas recientemente han sido otorgados a investigadores que se desempeñan en dicha rama.

La importancia y utilidad de los teoremas de índice radica en que nos permiten calcular invariantes topológicos como índice de un operador de Fredholm.

### ¿Qué es el índice de un operador?

Para explicar de manera amena a qué nos referimos cuando hablamos del índice de un operador, mostraremos un conocido ejemplo, trabajando con operadores en álgebra lineal.

**Ejemplo 3** Partiendo del Teorema del Rango, tenemos que para una matriz  $T$  de tamaño  $M \times N$ , con entradas complejas:

$$N = \dim(\text{Ker}(T)) + \dim(\text{Ran}(T)),$$

dado que el rango es el complemento ortogonal al núcleo del adjunto

$$N = \dim(\text{Ker}(T)) + \dim(\text{Ker}(T^*)^{\perp})$$

y puesto que la dimensión del complemento ortogonal al núcleo del adjunto es igual a la dimensión total menos la dimensión del núcleo del adjunto

$$N = \dim(\text{Ker}(T)) + M - \dim(\text{Ker}(T^*)).$$

Restando  $M$  a ambos lados de la ecuación obtenemos el índice del operador.

$$\text{Ind}(T) = N - M = \dim(\text{Ker}(T)) - \dim(\text{Ker}(T^*)).$$

El índice calculado es un invariante topológico, es decir, invariante bajo deformaciones continuas. Podemos observar fácilmente que si modificamos las entradas de la matriz  $T$  sin variar su tamaño, el índice se mantiene igual, ya que  $M$  y  $N$  no son cambiados, aunque la dimensión del  $\text{Ker}(T)$  y del  $\text{Ker}(T^*)$  puede variar, la diferencia entre ellas permanece invariante.

Pese a que en este caso es evidente que para matrices cuadradas ( $M = N$ ) el índice siempre es nulo, dicha característica no se mantiene para la generalización al infinito.

## 2.1 Operador de Fredholm

Antes de dar la definición de los operadores de Fredholm procederemos a dar una breve introducción sobre los espacios de Hilbert, información necesaria para el entendimiento de los operadores de Fredholm.

Sabemos que el producto interno en un espacio vectorial  $\mathcal{H}$  infiere una norma

$$\|v\| = \sqrt{\langle v, v \rangle}$$

se dice que  $\mathcal{H}$  es un espacio de Hilbert si es completo respecto a esta norma, es decir, toda sucesión de Cauchy de elementos del espacio converge a un elemento que también pertenece a dicho espacio, es común visualizarlo como un espacio sin huecos.

**Definición 2** Se dice que un operador lineal y continuo  $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  es Fredholm si y sólo si  $\dim(\text{Ker}(T)) < \infty$  y  $\dim(\text{Ker}(T^*)) < \infty$ .

$$\text{Además, } \text{Ind}(T) := \dim(\text{Ker}(T)) - \dim(\text{Ker}(T^*))$$

Donde  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  es el espacio de operadores acotados y el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  es el espacio de sucesiones de cuadrado sumable, es decir,  $\mathcal{H} = l^2(\mathbb{N}) = \{(S_n)_{n \geq 1} \text{ tal que } S_n \in \mathbb{C} \text{ y } \sum_{n \geq 1} |S_n|^2 < \infty\}$ .

**Nota:** es importante mencionar que para operadores de Fredholm *cuadráticos* sí se puede tener índice distinto de cero.

## Primer Teorema de Índice

### Teorema 1 (*Fritz Noether 1922*)

Para una función diferenciable (definida en el toro de dimensión uno)  $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{T}^1)$  invertible y la proyección de Hardy  $\square : l^2(\mathbb{Z}) \rightarrow l^2(\mathbb{N})$

$$\#Rot(f) = Ind(\square A \square)$$

donde  $f$  es la función que prepresenta a la curva cerrada y  $A$  es el operador de convolución, el cual no es ms que la transformada de Fourier de  $f$  vista como un operador de multiplicación.

Como se observa, tenemos una manera de calcular invariantes topológicos a partir de índice de operadores. A continuación veremos como calcular estos índices de manera simple, siendo obtenidos incluso de manera rápida al utilizar distintos métodos numéricos.

## 3 Operador de Bott

Como se observó anteriormente, para calcular invariantes topológicos podemos simplemente calcular el índice de un operador de Fredholm. Lo interesante es que dicho índice se puede obtener como la signatura de una matriz finita. Tal vez sea necesario trabajar con matrices de gran tamaño, pero finitas después de todo.

Para un parámetro de acoplamiento  $\kappa > 0$  y un operador local (las entradas decrecen conforme aumenta la distancia respecto a la diagonal) e invertible (el 0 no es un EigenValor)  $H$  en  $l^2(\mathbb{Z}^d)$  obtenemos

$$B_\kappa = \begin{pmatrix} \kappa D & H \\ H^* & -\kappa D \end{pmatrix} = B_\kappa^*$$

$D$  es el operador de Dirac en  $l^2(\mathbb{Z}^d)$ , definido de la siguiente forma

$$D = \sum_{j=1}^d \chi_j \gamma_j$$

donde los  $\chi_j$  son operadores de posición y  $\gamma_j$  representa las matrices de Pauli. Como es de observarse, el operador de Dirac no es acotado, debido a que el operador de posición  $\chi_j$  crece rápidamente con la distancia. Por lo tanto, podemos ver que  $H$  puede ser considerado como una perturbación en  $B_k$ , dado que al ser local, está acotado.

Para poder calcular la signatura, se toma una restricción, reduciendo así el operador a tamaño finito. Esto se logra aplicando condiciones Dirichlet al operador  $H$  y tomando la

restricción  $\mathbb{D}_\rho = \{x \in \mathbb{Z}^d \text{ tal que } |x| \leq \rho\}$ , obteniendo para un parámetro de acoplamiento  $\kappa$  y una restricción a tamaño  $\rho$  el siguiente operador

$$B_{\kappa,\rho} = \begin{pmatrix} \kappa D_\rho & H_\rho \\ H_\rho^* & -\kappa D_\rho \end{pmatrix}$$

### 3.1 Teorema Schulz-Loring

**Teorema 2 (H. Schulz, Loring 2017)**

Sea  $H : l^2(\mathbb{Z}^d) \rightarrow l^2(\mathbb{Z}^d)$  invertible, con gap  $g = \|H^{-1}\|^{-1}$

Si se mantiene tanto la cota de localidad

$$\|[D, H]\| \leq \frac{g^3}{18\|H\|\kappa}$$

como

$$\frac{2g}{\kappa} \leq \rho$$

entonces el operador  $B_{\kappa,\rho}$  es invertible y se tiene que

$$\frac{1}{2} \text{Sign}(B_{\kappa,\rho}) = \text{Ind}(\Pi H \Pi)$$

Con este teorema vemos que para obtener los invariantes topológicos basta con calcular la signatura de esta matriz de volumen finito, reduciendo así el problema y permitiendonos apoyarnos en computadores para su solución.

## 4 Cálculo Numérico de Signatura

Sea  $H \in \text{Mat}(M \times M, \mathbb{C})$  una matriz autoadjunta e invertible, procedemos a descomponer  $H$  en su parte real e imaginaria, para poder trabajar con ella después de formar una matriz puramente real.

Teniendo  $H$  entradas complejas:

$$H = A + iB$$

con  $A, B \in \text{Mat}(M \times M, \mathbb{R})$

$$A = \frac{1}{2}(H + \bar{H}) \quad B = \frac{1}{2i}(H - \bar{H})$$

donde  $\bar{H}$  representa el conjugado de la matriz  $H$  y dado que  $H$  es autoadjunta, tenemos las siguientes relaciones respecto a las transpuestas

$$A = A^t \quad y \quad B = -B^t.$$

Sean  $\phi, \varphi \in Mat(M \times 1, \mathbb{R})$ , tal que  $\lambda$  es el EigenValor de  $H$  asociado al EigenVector  $(\phi + i\varphi)$ . Por la definición de EigenValor y EigenVector tenemos

$$H(\phi + i\varphi) = \lambda(\phi + i\varphi)$$

$$(A + iB)(\phi + i\varphi) = A\phi - B\varphi + i(B\phi + A\varphi) = \lambda\phi + i\lambda\varphi$$

$$\begin{pmatrix} A\phi - B\varphi \\ B\phi + A\varphi \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \phi \\ \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & -B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \varphi \end{pmatrix}$$

Es decir, todo EigenValor de  $H$  es EigenValor de  $\tilde{H}$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} A & -B \\ B & A \end{pmatrix}$$

Además

$$\tilde{H} \begin{pmatrix} \varphi \\ -\phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & -B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ -\phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A\varphi + B\phi \\ B\varphi - A\phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\varphi \\ -\lambda\phi \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \varphi \\ -\phi \end{pmatrix}$$

donde

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ -\phi \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} \phi \\ \varphi \end{pmatrix}$$

e incluso observamos que uno no es combinación lineal del otro.

De lo anterior se tiene que  $\tilde{H}$  posee el mismo espectro que  $H$ , con la diferencia de que  $\tilde{H}$  presenta el espectro con multiplicidad 2, ya que cada EigenValor está asociado a dos distintos EigenVectores,  $\begin{pmatrix} \phi \\ \varphi \end{pmatrix}$  y  $\begin{pmatrix} \varphi \\ -\phi \end{pmatrix}$ .

Por lo tanto

$$Sign(H) = \frac{Sign(\tilde{H})}{2}$$

Una vez que hemos formado la matriz puramente real y aprovechando que el hecho de que  $\tilde{H}$  sea autoadjunta, tenemos que es simétrica. Luego, procedemos a utilizar un algoritmo bastante útil.

Para matrices reales y simétricas puede realizarse la descomposición  $LDL^t$ , es decir, podemos expresar nuestra matriz como

$$\tilde{H} = LDL^t$$

donde:

$L$  es una matriz triangular con entradas unitarias en la diagonal, y  $D$  es una matriz real diagonal a bloques, cuyas entradas en la diagonal o bien son bloques de  $1 \times 1$  (números reales) o son bloques de  $2 \times 2$  de la forma

$$\begin{pmatrix} 0 & k \\ k & 0 \end{pmatrix}$$

Del teorema de Sylvestre tenemos que toda la información de la signatura de  $\tilde{H}$  se encuentra en  $D$ . Los bloques de  $2 \times 2$  no afectan en la signatura, únicamente el signo de los bloques  $1 \times 1$ .

### 4.1 Algoritmo de Cholesky

Para calcular la signatura de  $D \in Mat(N \times N, \mathbb{R})$  utilizaremos el algoritmo de Cholesky, el cual consiste en realizar varias iteraciones, reduciendo el tamaño de  $D$ , como se puede observar a continuación.

1. Buscar en la diagonal entradas no nulas, detener la búsqueda si se encuentra alguna; si no ir al paso 4.
2. Agregar a la signatura el signo del elemento  $\mu$  encontrado (si  $\mu > 0$  sumar 1 a la signatura, sino restar 1).
3. Permutar el elemento  $\mu$  posicionado en  $D_{j,j}$  hacia  $D_{1,1}$ , intercambiando la columna 1 por la columna  $j$  y haciendo después lo mismo para los renglones obtenemos

$$PDP^t = \begin{pmatrix} \mu & \nu^t \\ \nu & A \end{pmatrix}$$

donde

$$\nu \in Mat(N - 1 \times 1, \mathbb{R}), \quad A \in Mat(N - 1 \times N - 1, \mathbb{R})$$

con  $A$  manteniendo la simetría.

Luego

$$D = A - \frac{1}{\mu} \nu \nu^t$$

donde ahora  $D$  es de tamaño  $(N - 1 \times N - 1)$ , después se inicia el algoritmo de nuevo.

4. Al encontrarse sólo entradas nulas en la diagonal, buscamos una entrada diferente de 0 en la primer columna (debe existir ya que el 0 no es EigenValor de  $D$ ).

5. Permutar el elemento (no nulo) encontrado  $k$  posicionado en  $D_{i,1}$  hacia  $D_{2,1}$  y el posicionado en  $D_{1,i}$  hacia  $D_{1,2}$ , obteniendo así

$$PDP^t = \begin{pmatrix} B & \nu^t \\ \nu & C \end{pmatrix}$$

donde

$$B = \begin{pmatrix} 0 & k \\ k & 0 \end{pmatrix}$$

$$\nu \in Mat(N - 2 \times 2, \mathbb{R}), \quad A \in Mat(N - 2 \times N - 2, \mathbb{R})$$

con  $C$  manteniendo la simetría.

Luego

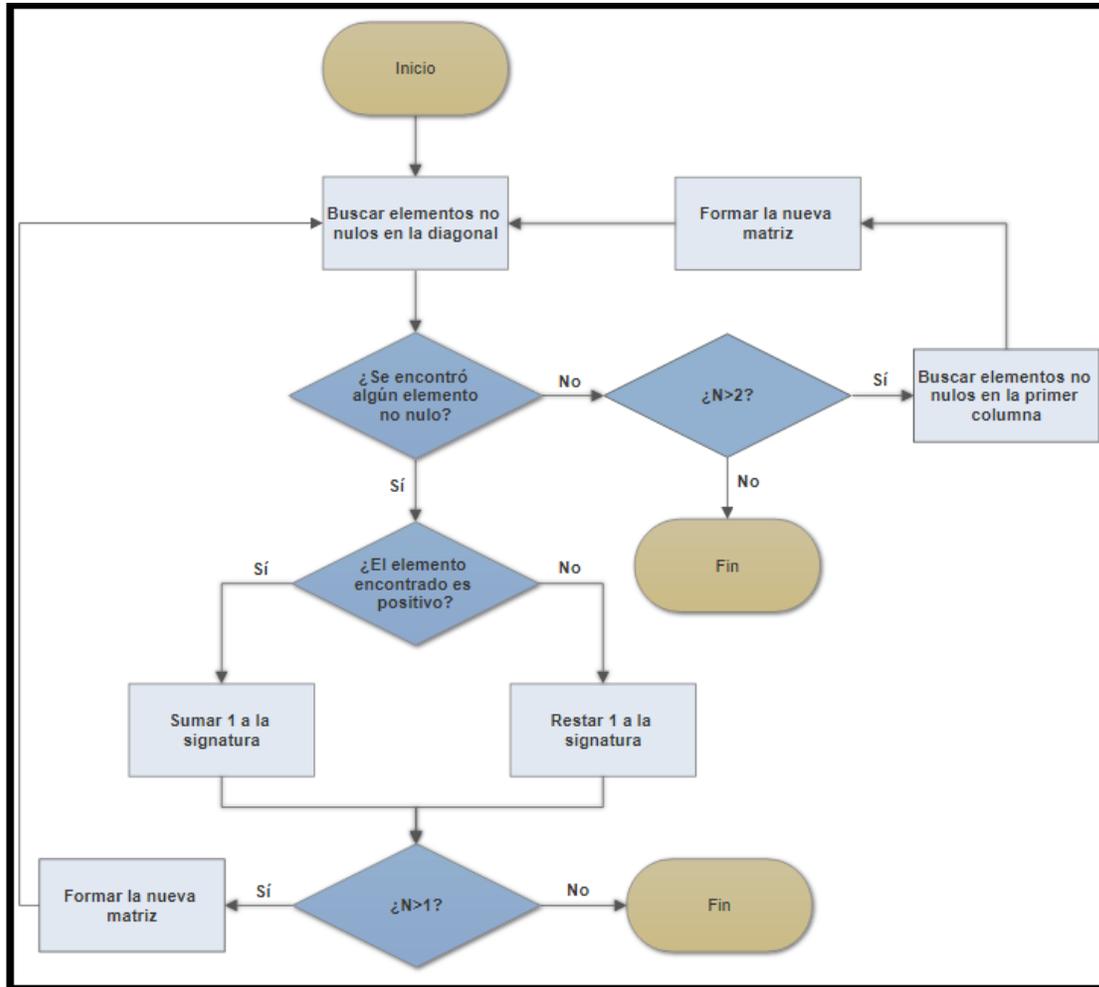
$$D = C - \nu \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{k} \\ \frac{1}{k} & 0 \end{pmatrix} \nu^t$$

donde ahora  $D$  es de tamaño  $(N - 2 \times N - 2)$ , después se comienza de nuevo el algoritmo.

De esta manera obtenemos

$$Sign(D) = Sign(\tilde{H}) = 2Sign(H)$$

Pudiendo así despejar fácilmente la signatura de  $H$ . El siguiente diagrama de flujo representa de manera simple el algoritmo a realizar.



## 5 Conclusiones

A partir de la investigación realizada se obtiene una manera práctica y sencilla de calcular invariantes topológicos, aprovechando la gran cantidad de conexiones que se presentan entre las diferentes ramas de las Matemáticas.

Una vez conocida la definición de invariante topológico, se observó que pueden ser calculados a partir de teoremas de índice, es decir, como índice de un operador de Fredholm, luego, al utilizar el Operador de Bott y su relación con el índice de un operador de Fredholm, reducimos el problema de cálculo de un invariante a encontrar la signatura del Operador de Bott.

Después de tener el algoritmo para calcular la signatura, se procedió a realizar la programación tanto en lenguaje *C* como en *Octave*, el principal ejemplo con el que se trabajó fue con el modelo de Haldane, el cual es útil para representar sistemas relacionados con conducción, así como para modelar materiales sujetos a un determinado campo magnético.

Para el modelo de Haldane se utilizó el siguiente Hamiltoniano

$$\left( \begin{array}{cc} t_2(e^{i\phi}(S_1^* + S_2 + S_3) + e^{-i\phi}(S_1 + S_2^* + S_3^*)) + M & t_1(S_1^* + S_2^* + I) \\ t_1(S_1 + S_2 + I) & t_2(e^{i\phi}(S_1 + S_2^* + S_3^*) + e^{-i\phi}(S_1^* + S_2 + S_3)) - M \end{array} \right)$$

Se obtuvieron muy buenos resultados con los ejemplos empleados y se continua con la investigación tanto para la obtención de mayores avances como para el modelado de diversos fenómenos con el uso de los métodos planteados anteriormente.

## References

- [1] E. Prodan, H. Schulz-Baldes, *Bulk and boundary invariants for complex topological insulators: From K-theory to physics*, (Springer Int. Pub., Szwitzerland, 2016).
- [2] RUBIANO O., GUSTAVO N., *Topología General*, Segunda Edición, Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, 2002.
- [3] T. Loring, H. Schulz-Baldes, *Finite volume calculations of K-theory invariants*, arXiv:1701.07455.