

41

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE CIENCIAS



PROPIEDADES ESTADISTICAS DE
ALGUNOS SISTEMAS MECANICOS

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
F I S I C O
P R E S E N T A

ARTURO OLVERA CHAVEZ

MEXICO, D. F.

1981



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.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

INDICE

0. Introducción	1
1. Propiedades estadísticas de sistemas mecánicos.....	3
a) Azar y determinismo	3
b) El Azar y como detectarlo	6
c) Herramientas matemáticas adecuadas para el estudio del azar	8
2. Elementos de la teoría ergódica	9
a) Teoría ergódica y azar	9
b) Sistemas mecánicos	9
c) Teorema de Poicaré y Birkhoff	10
d) Sistemas ergódicos	11
e) Sistemas mezclantes	12
f) Sistemas K y sistemas C	14
g) Azar en sistemas mecánicos	15
3. Análisis de algunos sistemas mecánicos con propiedades estadísticas	17
a) El oscilador armónico	17
b) Resonancias en osciladores y la Ecuación Universal	21
c) Estabilidad y el teorema de KAM.....	29
d) Inestabilidad y azar	31
e) Los modelos mecánicos y las simulaciones	35
4. Estudio de cadenas de osciladores	37
a) El modelo de la cadena de osciladores	38
b) Modos normales	41
c) Estudio sobre cadenas de osciladores anarmónicos	43
d) Bocchieri et al. (1970) y Galgani et al. (1972).....	46
e) Descripción del modelo y discusión del método numérico	49
f) Datos iniciales y forma de calcular los promedios	50
g) Resultados obtenidos	51
h) Conclusiones	53
5. Conclusiones	56
6. Apéndice	58
7. Bibliografía.....	70

Introducción

La física contemporánea no sólo se ha distinguido por el desarrollo de la mecánica cuántica y la teoría de la relatividad, sino también por la incorporación de nuevos elementos a la mecánica clásica, entre los que destacan la mecánica no lineal, la teoría ergódica y el uso de nuevas herramientas como la computadora electrónica. Con esto, la mecánica clásica se ha vuelto un campo de vanguardia de la física moderna: algunos viejos problemas se han podido resolver y han aparecido nuevos campos de estudios.

El uso de la computadora electrónica en la solución de ecuaciones diferenciales en forma numérica abre al físico la posibilidad de estudiar el comportamiento de sistemas complicados, ya sea por el número de ecuaciones a resolver en forma simultánea o por la complejidad de éstas. Gran número de problemas mecánicos anteriores a la aparición de la computadora se tuvieron que simplificar agregando hipótesis adicionales o simplemente se abandonaron. El problema de los tres cuerpos es un ejemplo de la limitación que presenta no poder resolver algunas de ecuaciones diferenciales.

Por otro lado, en la mecánica, las ecuaciones de movimiento de gran número de sistemas no tienen una solución analítica: solamente en forma numérica se puede estudiar su comportamiento. En otros casos, aunque sean conocidas en forma exacta las soluciones a las ecuaciones de movimiento, sólo importa el comportamiento global del sistema y no el saber la posición y velocidad de cada partícula del sistema a cada tiempo, como es el caso de la mecánica estadística, donde el promedio sobre un ensamble sirve para agrupar y clasificar a los diferentes microestados del sistema. Otro ejemplo es la teoría ergódica que, respaldada con el cálculo numérico, ofrece nuevas formas de tratar los sistemas mecánicos al recurrir a nuevas hipótesis para simplificar y ha dado como resultado que la nueva mecánica clásica ha retomado problemas de la mecánica estadística, a veces solucionándolos sin agregar ninguna suposición. Así, se ha mostrado que en general los sistemas mecánicos tienen un conjunto de propiedades más amplio del que se conocía antes.

De estas propiedades destacamos las de tipo estadístico (en sistemas mecánicos). En esta tesis revisaremos, en forma de monografía, algunos avances en este campo. Mostraremos cómo puede detectarse azar en un sistema mecánico; en particular estudiaremos las propiedades estadísticas en cadenas de osciladores anarmónicos (que es un modelo utilizado en la teoría del estado sólido).

En el desarrollo reciente de la mecánica no lineal, se han obtenidos resultados sorprendentes, tales como los teoremas sobre estabilidad de los sistemas, irreversibilidad en sistemas dinámicos, etc. De los resultados más importantes destaca el sistema de una cadena de osciladores con un potencial tipo Lennard-Jones, que es similar al que existe entre moléculas (modelo de un cristal monoatómico unidimensional). Este trabajo fue realizado por un grupo de investigadores italianos (23,26), los cuales afirman haber obtenido, por medio de simulaciones numéricas, una distribución de energía en función de la frecuencia similar a una distribución de Planck, sin hacer ninguna hipótesis cuántica. Esto por sí solo abre la posibilidad de pensar que los sistemas cuánticos puedan ser descritos con hipótesis puramente clásicas, donde las bases de la mecánica cuántica estarían en la mecánica clásica.

s'ia. Dado la importancia de este modelo de cadena de osciladores, decidimos analizarlo con todo cuidado. Se estudiaron los diferentes trabajos relativos a cadenas de osciladores no lineales y sus resultados, se buscó reproducir numéricamente las distribuciones de energía que se habían obtenido en el modelo antes mencionado. Apoyandonos en los resultados que obtuvimos numéricamente llegamos a la conclusión de que el sistema con potencial Lennard-Jones no posee propiedades estadísticas a energías bajas y medias (aproximadamente a una tercera parte de la profundidad del pozo de potencial) y por lo tanto no posee ningún tipo de distribución, ya sea equipartición o tipo Planck, debido a que este sistema es fuertemente dependiente de las condiciones iniciales y no posee frecuencias resonantes que le permitan tener un comportamiento inestable (indispensable en un sistema con propiedades estadísticas). Así concluimos que los resultados de estos autores no son correctos y además mostramos que nuestros resultados no contradicen a la mecánica estadística a la teoría ergódica.

Para poder estudiar la cadena de osciladores y determinar sus propiedades estadísticas reflejadas en la distribución de energía como función de la frecuencia, tenemos en primer lugar que preguntarnos qué es un sistema mecánico y cómo se relaciona con el azar. Definida la forma de detectar propiedades estadísticas en los sistemas mecánicos introduciremos la herramienta matemática que nos asocie propiedades dinámicas del sistema con la aparición de azar. Con estos elementos podremos estudiar con cierta profundidad a un oscilador anarmónico y determinar qué parámetros implican la aparición de las propiedades estadísticas, y finalmente extrapolar estos resultados a una cadena de osciladoras, teniendo así la teoría suficiente para analizar y simular diferentes formas de potenciales en la cadena, en especial el tipo Lennard-Jones.

En el primer capítulo nos introduciremos al estudio de sistemas mecánicos y la forma en que es posible detectar azar en tales sistemas. El siguiente capítulo contiene algunos resultados y teoremas de la teoría ergódica que nos serán de gran utilidad para estudiar y entender problemas no lineales. En el tercer capítulo iniciaremos el estudio del oscilador anarmónico, sus propiedades y las condiciones para que se muestre como un sistema estocástico.

El último capítulo está dedicado al estudio de cadenas de osciladoras anarmónicas; mostraremos el desarrollo de algunos trabajos relativos a sistemas similares realizados por diferentes autores. Analizaremos numéricamente que realizamos sobre la cadena de osciladores con potencial Lennard-Jones, mostramos finalmente las inconsistencias que existen en las conclusiones del trabajo de los autores italianos.

Esta tesis está orientada a introducir al lector a la mecánica de sistemas no lineales y a las herramientas matemáticas en que se apoya. El capítulo tres muestran, con ayuda de ejemplos, cómo se aplican tales herramientas.

1. Propiedades Estadísticas de los Sistemas Mecánicos

Supongamos que observamos un fenómeno físico y que al cabo de gran número de mediciones no nos es posible predecir el próximo valor; aún más, incluso con un conjunto infinito de observaciones, no es posible predecir el siguiente valor. Decimos entonces que este proceso es azaroso. Por otro lado, un sistema mecánico es determinístico, ya que podemos predecir su posición y velocidad a cada momento. Los juegos de azar, como los dados o la ruleta, son sistemas mecánicos, entonces, cómo podemos hablar de azar en un sistema mecánico?. Aparentemente azar y sistemas mecánicos son incompatibles, pero los juegos de azar, que son estrictamente sistemas mecánicos, son los que nos llevan a pensar que el "azar" es una propiedad de los sistemas mecánicos. En este capítulo discutiremos la forma en que un sistema mecánico puede presentar comportamiento azaroso y cómo se puede detectar.

a) Azar y Determinismo

El jugador de ruleta siempre tiene la incertidumbre de donde caerá la esfera en la próxima jugada, no importando cuántas jugadas antes haya empezado a observarla. La secuencia de resultados no da ninguna información sobre los próximos lugares donde caerá, sin importar que tan larga sea esta secuencia, pudiendo ser incluso infinita. Igualmente, al observar varias tiradas sobre la ruleta, no podremos decir qué resultados precedieron a estas tiradas. El pasado y futuro del juego siempre son un misterio, sin embargo se puede afirmar con seguridad que la probabilidad de que la esfera caiga en algún número será un treinta y cuatroavo. Esto es un "juego de azar".

Nadie puede negar que el juego de ruleta es un proceso mecánico, donde intervienen choques elásticos, momentos de inercia, fuerzas, etc. Sin embargo, ningún jugador de ruleta puede determinar todas las condiciones iniciales y proponer hamiltoniano que describa al sistema antes de apostar; es imposible lograrlo: sólo podrá decir con qué probabilidad caerá en tal o cual casilla. La única observación que le interesa es el casillero donde cayó la esfera y pasar por alto todos los demás parámetros. Además es consciente de que aunque pudiera proponer un modelo y midiera todas las condiciones iniciales, una pequeñísima variación en ellas llevaría a resultados totalmente diferentes a los que hubiera pronosticado.

La moraleja que nos da el jugador es que todo proceso azaroso tiene tres elementos importantes:

- I) La observación restringida de parámetros que intervienen en el sistema mecánico.
- II) La inestabilidad en las condiciones iniciales del sistema.
- III) A todo sistema con comportamiento azaroso se le puede asociar una distribución de probabilidad.

Iremos discutiendo estos tres elementos en todo el trabajo y mostraremos las características que debe tener un sistema mecánico para que posea propiedades estadísticas.

Para establecer tales propiedades debemos primero definir qué entendemos por un sistema mecánico y a partir de eso determinar cómo debe observarse para poder detectar en el sistema un comportamiento azaroso. Como se dijo arriba, el observar al sistema en forma restringida, sin medir todos sus parámetros, nos puede llevar a detectar azar, así que estableceremos más adelante qué se entiende, en forma precisa, por observar al sistema en forma restringida.

Los sistemas mecánicos son aquellos que se rigen por las leyes de Newton. De la segunda ley resulta un sistema de ecuaciones diferenciales de segundo grado, las cuales se conocen como ecuaciones de movimiento del sistema. Cuando se resuelven las ecuaciones de movimiento de un sistema mecánico, las soluciones f_i quedan en función de las condiciones iniciales y del tiempo:

1.005

$$\begin{aligned} q_1 &= f_1(q_1^0, \dots, q_N^0, p_1^0, \dots, p_N^0, t) \\ &\vdots \\ p_N &= f_{2N}(q_1^0, \dots, q_N^0, p_1^0, \dots, p_N^0, t) \end{aligned}$$

Siendo $x_0 = (q_1, \dots, p_N)$ las condiciones iniciales de posición y momento en el espacio fase, y $x_t = (q_1, \dots, p_N)$ la posición y momento al tiempo t . El sistema de ecuaciones 1.005 puede ser considerado como una transformación del punto x_0 al tiempo $t=0$, al punto x en el tiempo $t=t$. Visto como transformación, podemos mapear cualquier punto del espacio fase G en otro punto sobre el mismo espacio G . Entonces la transformación va de G a G y depende del tiempo. Para diferentes tiempos, el punto x_0 en G será mapeado a diferentes puntos en G . La transformación 1.005 la representaremos en la forma compacta {1}:

1.006

$$x_t = e^{-iH} x_0$$

donde

1.007

$$Hf = [H, f] = \sum_{i=1}^N \partial_{p_i} H \partial_{q_i} f - \partial_{q_i} H \partial_{p_i} f$$

La transformación 1.006 (o también 1.005) forman un grupo en t , ya que cumplen con las tres propiedades:

1.008

$$\begin{aligned} \text{i) } e^{-t, h}(e^{-t, h} x_0) &= e^{-(t, t, h)} x_0 \\ \text{ii) } e^{-0, h} x_0 &= x_0 \\ \text{iii) } e^{-(-t), h}(e^{-t, h} x_0) &= x_0 \end{aligned}$$

Por otro lado, la distancia entre dos puntos en G la definimos como la distancia euclidiana:

1.009

$$d = \sqrt{\sum_{i=1}^n (\Delta q_i^2 + \Delta p_i^2)}$$

Formalmente definiremos un sistema mecánico conforme a los siguientes elementos (2):

- i) Un espacio que llamamos de fase, G, de 2N dimensiones con coordenadas $x=(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$
- ii) una medida definida en G
- iii) Un grupo de transformación que va de G a G con un parámetro que llamaremos tiempo t.

Llamamos órbita a todos los puntos generados al aplicar a x_0 todos los elementos del grupo e^{-th} (que es equivalente a definirlo como todos los puntos por los que pasaría el punto x al aplicarle el "propagador hamiltoniano" para todo tiempo). Como las órbitas no se cruzan (3), todo punto pertenece a una sola órbita (así las órbitas son clases de equivalencia). En la figura 1.10 podemos apreciar una parte de la órbita generada de $t=0$ a $t=t$ a partir de x_0 . La hipersuperficie L que observamos en esta figura (parte sombreada) forma un volumen de dimensión menor a G. En ella veremos que la órbita la cruza varias veces en diferentes puntos. Si la órbita es cerrada el número de puntos será finito, en el otro caso será infinito.

Cada uno de los cruces de la órbita en L corresponde a un tiempo t en la transformación 1.008, que en conjunto corresponden a mediciones hechas en esos tiempos.

Si nos restringimos a observar solamente a L, tendremos un número de parámetros menor que G (la dimensión de L es menor que G). Físicamente tenemos en L una descripción reducida del sistema mecánico: un punto de L no es suficiente para describir completamente al sistema mecánico. Simplemente hemos reducido la información sobre el sistema a un número más pequeño e incompleto de parámetros. Llamaremos a este proceso "observación restringida de parámetros" y a L lo nombraremos "plano de corte".

La secuencia de puntos que van apareciendo en el plano de corte puede ser muy variada. Cuando en G las órbitas son cerradas, en L tendremos solo un conjunto finito de cruces (figure 1.20(a)). Para órbitas abiertas, el número de cruces en L será infinito (suponiendo que el sistema es limitado en energía y acotado en posición). Los puntos de cruce pueden estar sobre una región en L de di-

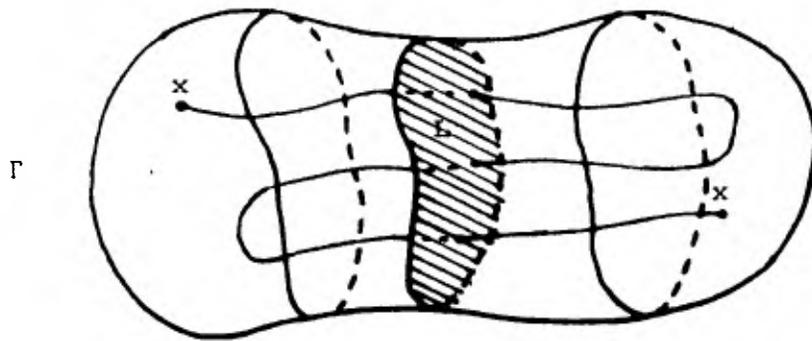


Figura 1.10

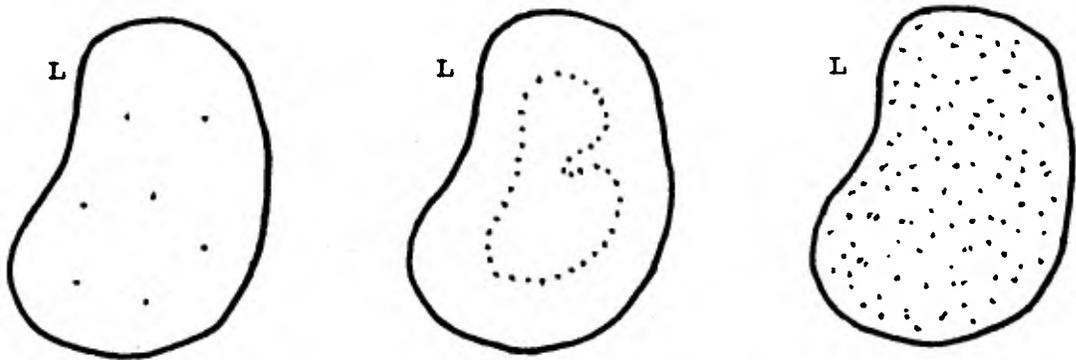


Figura 1.20

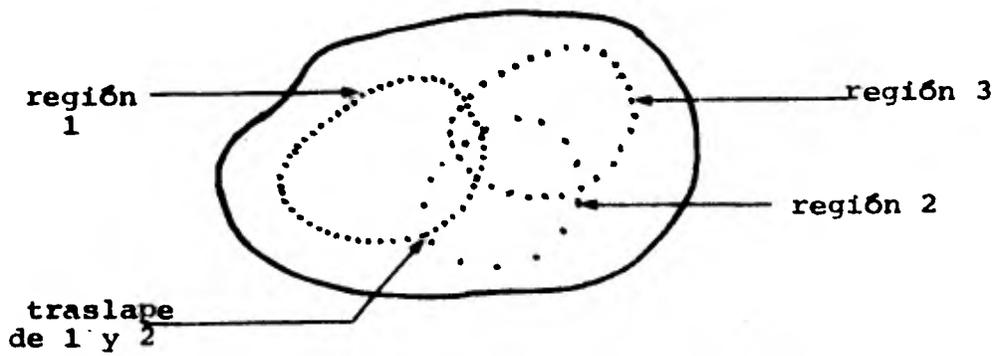


Figura 1.30

dimensión menor, como en figura 1.20(b), la cual podría describirse en forma algebraica. También los puntos de cruce de la órbita pueden llenar densamente a L sin seguir algún patrón de aparición, o sea, conociendo únicamente los puntos aparecidos en L al tiempo t, es imposible saber el lugar donde sucederá el siguiente cruce, como en la figura 1.20(c).

El caso (b) de la figura 1.20 define una región que podamos describir con una función analítica de dimensión menor a L. Si L es de dimensión dos (una superficie), estas regiones serían curvas suaves, ya sean abiertas o cerradas. En este último caso decimos que son cuasiperiódicas. Diferentes órbitas en G cruzarán a L en diferentes regiones, las cuales pueden traslaparse en algunos lugares. Si estas regiones son de dimensión menor que L y se pueden describir analíticamente, se verían como en la figura 1.30.

El caso (c) en la figura 1.20 es el más interesante; cada órbita en G cruzará en todo L, no habrá región en L por donde no cruce la órbita. Además la secuencia de cruces puede no tener ninguna relación una con otra, como si aparecieran azarosamente aunque la órbita esté bien definida en G por el punto x_0 y e^{-it} . En el capítulo III estudiaremos bajo qué condiciones una región de dimensión menor que L, como la figura 1.20(b), puede convertirse en una región como la figura 1.20(c) al cambiar algún parámetro. También examinaremos cuando la secuencia de aparición de puntos para regiones que llenan densamente a L (figura 1.20(c)) puede considerarse azarosa y las propiedades del hamiltoniano que genera tales órbitas.

Concluimos lo siguiente: Cuando en un sistema mecánico se detecta un comportamiento azaroso, quiere decir que el observador está restringido a observar al sistema en una hipersuperficie de G, ya que si observara globalmente al sistema en todo G concluiría que dicho sistema es determinístico.

Falta sin embargo definir cuando una sucesión de puntos que aparecen en todo L la podemos llamar azarosa. Necesitamos un método preciso para hacer esta decisión. En la siguiente sección presentaremos un algoritmo para decidir cuando una sucesión es azarosa, precisando a su vez el concepto de azar.

b) El Azar y como detectarlo

Supongamos que tenemos una sucesión de datos, normalizados entre 0 y 1, y deseamos encontrar un algoritmo para decidir si es aleatoria. El primer problema es determinar qué entendemos por azar. Utilizaremos la idea de Knuth {4} para determinarlo.

Tenemos entonces una sucesión, definida como un conjunto ordenado de elementos $\{u_i\}$, donde i va de 1 a ∞ . Llamaremos a $\{u_i\}$ uniformemente distribuida si para todos números a y b entre 0 y 1 cumple con:

$$P_r(a < u_i < b) = \lim_{n \rightarrow \infty} (V_n^a / n) = b - a$$

1.020

$$V_n^a = \sum_{i=1}^n f(a, b, u_i) \quad f(a, b, u_i) = \{1 \text{ si } a < u_i < b, 0\}$$

La cantidad P_j representa la probabilidad de que u_j se encuentre entre a y b , y es igual al intervalo o medida entre b y a . Esta condición no implica azar, ya que una sucesión del tipo:

$$u_{j+1} = (u_j + \alpha) \text{ Mod } 1 \quad \alpha \text{ Irrracional}$$

1.030

la cumple, y u_{j+k} es totalmente predecible a partir de u_j .

Llamaremos a $\{u_j\}$ k -distribuida si para toda pareja de números a_j y b_j entre 0 y 1, y con $j=1 \dots k$ se cumple que:

$$1.040 \quad P_j(a_1 < u_1 < b_1, \dots, a_k < u_{j+k-1} < b_k) = \prod_{i=1}^k (a_i - b_i)$$

Esta condición asegura que no se repetirá algún patrón en la sucesión de menos de k elementos. En estadística se prueba la correlación de los términos (u_j, u_{j+k}) utilizando la siguiente ecuación:

$$1.050 \quad C_0(u_j, k) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(1/n) \sum_{i=1}^n u_i u_{i+k} - (1/n)^2 \sum_{i=1}^n u_i \sum_{i=1}^n u_{i+k}}{\sqrt{\left((1/n) \sum_{i=1}^n u_i^2 - \left((1/n) \sum_{i=1}^n u_i \right)^2 \right) \left((1/n) \sum_{i=1}^n u_{i+k}^2 - \left((1/n) \sum_{i=1}^n u_{i+k} \right)^2 \right)}}$$

Se demuestra (4) que no existe correlación entre u_j y u_{j+k} con $j=1, \dots, k$ (o sea $C_0(u_j, j) = 0 \quad j=1, \dots, k$).

Cuando $k \rightarrow \infty$, entonces el producto en 1.040 tiende a cero y a $\{u_j\}$ la llamaremos co-distribuida. Bajo esta situación no existe correlación de ningún orden entre todos los términos de la sucesión $\{u_j\}$.

Por último, para asegurar que la sucesión $\{u_j\}$ sea azarosa, pediremos que toda subsucesión $\{u_j^i\}$, donde los elementos u_j^i se eligen con algún algoritmo definido únicamente sobre los índices, sea uniformemente distribuida.

Así hemos llegado a una definición de sucesión azarosa como aquella que es co-distribuida y que cualquier subsucesión de ella es uniformemente distribuida.

Hay que aclarar que esta definición de azar sólo se aplica a distribuciones uniformes. Sin embargo, para otras distribuciones donde exista una función invertible que conecte esa distribución con la uniforme, la definición de azar aquí expuesta puede ser aplicada.

Debemos entonces aplicar esta definición de azar a las sucesiones de puntos que están en todo L .

c) Herramientas matemáticas adecuadas para estudiar el azar

Regresemos a la figura 1.20, ¿Qué podemos decir de la sucesión de puntos en L? Dado que en la sección anterior definimos azar, trataremos de aplicar el criterio en sucesiones de puntos sobre L.

En L podemos definir un conjunto de coordenadas independientes $v=(v_1, v_2, \dots, v_M)$ donde M es la dimensión de L. Cada punto de la sucesión tendrá entonces una coordenada asociada y al i-ésimo punto lo denotamos con las coordenadas $v_i=(v_1, v_2, \dots, v_M)$.

Se dice que la sucesión v_i es aleatoria si la sucesión de números es azarosa:

$$1.080 \quad \{v_i\} \text{ para cada } i$$

Suponemos que las coordenadas v_i las tenemos normalizadas entre 0 y 1.

Así definimos a una sucesión aleatoria de puntos en L, generados por el cruce de una órbita con esa hipersuperficie, si cumple la propiedad del párrafo anterior.

Esta definición de azar no es tan práctica como hubiésemos querido, ya que generalmente es muy engorroso probar que una sucesión es co-distribuida y que todas sus sub-sucesiones son uniformemente distribuidas: necesitaríamos infinito número de días de computadora para confirmarlo.

Será útil conectar tal definición de azar con propiedades del sistema mecánico que sean más fáciles de medir, de tal forma que el valor de algún parámetro, por ejemplo, nos asegure que la sucesión en L es azarosa.

La teoría ergódica será el medio de concebir los conceptos de uniforme, k e infinitamente distribuido de las sucesiones en términos de propiedades de transformación de volúmenes de G en G. Así, observando cómo evoluciona un volumen en G al aplicarle la transformación 1.008, podremos determinar cómo se comportarán las sucesiones de puntos de cruce en L, decidiendo directamente si son azarosas o no. Como aseguramos al principio del capítulo, la inestabilidad e independencia de las condiciones iniciales en un sistema mecánico dan pie a comportamientos azarosos en el sistema. Tales ideas y su relación con el azar se definirán con mayor precisión en los dos siguientes capítulos.

2. Elementos de la Teoría Ergódica

a) Teoría Ergódica y Azar

En esta sección esbozaremos algunos de los principales teoremas de la teoría ergódica y señalaremos su significado dentro de la mecánica y su relación con el azar. Las demostraciones de los teoremas no se darán; referiremos a la bibliografía.

En forma sencilla podemos decir que la teoría ergódica en la mecánica estudia el comportamiento de volúmenes de puntos en el espacio fase al ser transformado por el propagador hamiltoniano en el tiempo. Es el concepto de medida del volumen y su evolución en el tiempo lo que conectaremos (de una forma muy simplista y sin demostración) con los pasos seguidos en el capítulo anterior para obtener una sucesión azarosa.

b) Sistemas Mecánicos

Empezaremos redefiniendo un sistema mecánico de la siguiente forma: Debe poseer un espacio fase G , una medida definida en G que llamaremos m y un grupo de transformaciones Γ , que correspondería al grupo formado por el propagador hamiltoniano con el parámetro t . Denotaremos al sistema en forma compacta como $S(G, m, \Gamma)$. Pediremos además que el grupo Γ conserve la medida (teorema de Liouville (6,7)) y que el sistema esté acotado en energía y confinado en la posición. Esto significa que el sistema está acotado en el espacio fase G . La medida en G la definimos como el producto:

$$2.010 \quad d\mu = dp_1 dq_1 dp_2 dq_2 \dots dp_N dq_N$$

Entonces la medida del subconjunto A en G la calculamos como:

$$2.020 \quad \mu(A) = \int X_A(x) d\mu = \int_A d\mu$$

$$X_A(x) = \{ 1 \text{ si } x \in A, 0 \text{ en otro caso} \}$$

y del teorema de Liouville tenemos:

2.030

$$\mu(A) = \mu(e^{-tH}(A))$$

Esto significa que la medida se conserva. Además la transformación e^{-tH} debe ser canónica necesariamente (2).

c) Teorema de Poincaré y Birkhoff

Consideremos un sistema $S(G, m, \Gamma)$. Sabemos que un punto en G generará una órbita al evolucionar en el tiempo:

2.040

$$x_t = e^{-tH} x_0$$

Si el sistema es acotado en G , el teorema del retorno de Poincaré (5) asegura que x_t pasará, para alguna t , tan cerca de x_0 como deseemos. Podemos decir que S es un sistema cuasiperiódico, aunque el período pudiese ser arbitrariamente grande.

Definamos el promedio en el tiempo de alguna cantidad física observable $f(x)$, con x en G , de la siguiente forma:

2.050

$$\lim_{T \rightarrow \infty} (1/T) \int_0^T f(e^{-tH} x_0) dt = \bar{f}$$

y el promedio sobre el ensemble de f como la integral de f sobre todo G :

2.060

$$\int_G f(x) d\mu = \langle f \rangle$$

El teorema de Birkhoff (2,7) nos asegura que $f(x)$ existe (no diverge) para casi todo x en G , que es una función integrable (esta propiedad vale sólo con excepción de un conjunto de medida cero),

no depende del punto inicial de la órbita (x) que se haya elegido:

$$f(x) = f(e^{-tH}x_0)$$

Además cumple con la siguiente propiedad:

$$2.070 \quad \langle f \rangle = \langle \bar{f} \rangle$$

Lo cual nos dice que el promedio de la función en el ensemble es igual al promedio de todos los promedios temporales en el ensemble.

d) Sistemas Ergódicos

Se define que el sistema $S(G, m, T)$ es ergódico si los únicos conjuntos invariantes en G son los de medida 0 y 1. Por invariancia entenderemos que la transformación 1.006 al ser aplicada a un subconjunto A de G cumpla con:

$$2.080 \quad e^{-tH}x \in A$$

para casi todo x en A , o sea, la imagen de A es A .

Señalaremos que para casi toda órbita en un sistema ergódico, ésta pasará tan cerca de cualquier punto en G como queramos. En otras palabras, casi toda órbita en G llenará densamente G (3). De esto se concluye que si S es ergódico, no puede poseer ninguna integral aislada de movimiento (10) (como integrales aisladas o uniformes entenderemos a aquellas funciones $F(q,p) = \text{constante}$ que son univalueadas y que conmutan con H), ya que una integral aislada de movimiento en S representa un conjunto invariante en G de medida diferente a 0 o 1.

Cuando S es ergódico, los promedios de $f(x)$ en el tiempo y en el ensemble son idénticos; a partir de 2.070 esta propiedad queda escrita como:

$$2.100 \quad \bar{f} = \langle \bar{f} \rangle = \langle f \rangle$$

En mecánica estadística, 2.100 se conoce como la hipótesis ergódica de Boltzmann (7,9) (de ahí el nombre de teoría ergódica).

Cuando S es conservativo en la energía no puede ser ergódico, ya que implicaría que tiene una integral aislada. Sin embargo, por el teorema de Hopf (7), podemos redefinir a G y m en la hiperficie de energía constante (de dimensión menor) y aplicar sobre esta nueva G y m los teoremas

arriba mostrados. Para más integrales aisladas de movimiento se sigue el mismo procedimiento.

Si en la ecuación 2.100 sustituimos a $f(x)$ por la función característica χ_A de A en G, el sistema ergódico cumplirá con:

$$2.110 \quad \lim_{T \rightarrow \infty} (1/T) \int_t^{t+T} \chi_A(e^{-th}x_0) dt = \mu(A)$$

Donde la integral en la izquierda representa el tiempo promedio en que la órbita permanece en A al evolucionar en el tiempo y es igual a la medida de A. Esto significa que si el sistema S es ergódico, la probabilidad de encontrar al punto x al tiempo t en A será igual a la medida de A (la medida está normalizada a uno). Esto nos muestra que la sucesión de puntos de la órbita forma una sucesión uniformemente distribuida sobre G.

Sea L una hipersuperficie en G, entonces 2.110 se transforma en una sumatoria, ya que tendremos una sucesión de puntos generados por los cruces de la órbita con L, los que están ordenados en el tiempo, $\{x_i\}$. Si el sistema es ergódico, la sucesión $\{x_i\}$ será uniformemente distribuida, puesto que si B es un subconjunto en L, la probabilidad de que los puntos de la sucesión estén en B será igual a la medida de B (medida definida en L).

El párrafo anterior liga el concepto de ergodicidad con el de sucesión uniformemente distribuida expuesta en el capítulo anterior.

e) Sistemas Mezclantes

Cuando en un sistema S el subconjunto A de puntos en G evoluciona en el tiempo de manera tal que la probabilidad de encontrar al tiempo t órbitas de A en otro subconjunto B, es igual al producto de las medidas de A y B (2,3,9), esto es:

$$2.120 \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \mu((e^{-th}A) \cap B) = \mu(A)\mu(B)$$

decimos que tal sistema es mezclante.

Visto en otra forma, en un sistema mezclante, al cabo de un cierto tiempo (quizas muy grande), cualquier subconjunto de G tendrá la proporción de puntos provenientes de A y B en $t=0$ igual a la proporción que guardaban la medida de A y B con respecto a G en $t=0$. Este proceso es similar al que sucede cuando una gota de tinta se mezcla en un vaso de agua.

Se puede probar que un sistema mezclante es necesariamente ergódico, pero lo contrario no es

cierto {2,3}.

Extendiendo la definición de mezclante a más subconjuntos de G que se mezclen uniformemente al transcurrir el tiempo, la podemos poner de la siguiente forma {2,3}:

Sea el sistema S; lo llamaremos n-mezclante si para cualquier colección de subconjuntos A_j en G con $j=1, \dots, n$ y con una sucesión de tiempos definidos como $\{t_k\}_{k=1}^{\infty}$ y $j=1, \dots, n$ creciente para todo k:

$$2.130 \quad t_k^1 < t_k^2 < \dots < t_k^n$$

y con la propiedad de no convergencia:

$$2.140 \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \min_{1 \leq j \leq n} (t_k^j - t_k^{j-1}) = \infty$$

se cumple el siguiente límite:

$$2.150 \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \mu \left(\prod_{j=1}^n e^{-t_k^j H(A_j)} \right) = \prod_{j=1}^n \mu(A_j)$$

En otras palabras, cualquier conjunto de n subconjuntos en G se mezclarán uniformemente; la ecuación 2.150 nos asegura que después de un tiempo grande, en cualquier volumen pequeño de G tendremos una distribución de puntos de las órbitas generadas en los conjuntos A_j igual a la relación de la medida de los volúmenes de A_j con respecto a la medida de G.

Un sistema que sea n-mezclante será a su vez m-mezclante, con m menor que n. Cuando n=2, tenemos un sistema simplemente mezclante (2.120). Ahora pensemos en una hipersuperficie L en G, y definamos los puntos de la sucesión $\{t_k\}_{k=1}^{\infty}$ como los tiempos en que las órbitas cruzan a L. Tomemos los subconjuntos B_j , con $j=1, \dots, n$, definidos en L. Si S es un sistema n-mezclante cumplirá con la ecuación 2.150:

$$2.160 \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \mu \left(e^{-t_k^1 H(B_1)} \dots e^{-t_k^n H(B_n)} \right) = \prod_{j=1}^n \mu(B_j)$$

$$\text{con } t_k^1 < t_k^2 < \dots < t_k^n$$

Esta ecuación 2.160 nos da la probabilidad de que en los tiempos $t_k^1, t_k^2, \dots, t_k^n$, la intersección de los conjuntos B_j transformados por el propagador hamiltoniano sea igual al producto de las medidas de los subconjuntos B_j .

La ecuación 2.160 nos relaciona al sistema n-mezclante con las sucesiones n-distribuidas. La

probabilidad de que los n elementos consecutivos de la sucesión se encuentren en n regiones determinadas, es igual al producto de las medidas de tales regiones. Por esta razón, podemos decir que si un sistema es n -mezclante entonces tiene sucesiones n -uniformes en L .

f) Sistemas K y Sistemas C

Cuando un sistema es n -mezclante, con n arbitrariamente grande, llegamos a la definición de sistema K. Una álgebra σ de un sistema es la colección de todos los subconjuntos medibles en G , sus complementos, intersecciones y uniones. O sea es un conjunto contable de subconjuntos de G . La definición formal de sistema K es la siguiente: Dada una álgebra \mathcal{S} en G con una subálgebra M_0 , si cumple las siguientes tres propiedades el sistema:

$$1) \sigma^{-t}H(M_0) \supset M_0$$

$$2) \bigcap_{t=-\infty}^{\infty} \sigma^{-t}H(M_0) = M_0$$

$$3) \bigcap_{t=-\infty}^{\infty} \sigma^{-t}H(M_0) = \{ \phi, G \}$$

2.170

Entonces S es un sistema K (2,3). Esto equivale a pensar que todos los subconjuntos de la álgebra σ M_0 se mezclarán uniformemente al transcurrir el tiempo.

Los sistemas K están relacionados con las sucesiones ∞ -distribuidas en alguna hipersuperficie L en G , donde los puntos de cruce de las órbitas en L forman la sucesión de puntos. Además tenemos la propiedad de que cualquier subconjunto de la sucesión de puntos de cruce será distribuido uniformemente en L .

Estas ideas nos hacen notar que es suficiente tener un sistema K para que las sucesiones de puntos de cruce de las órbitas en L aparezcan en forma azarosa, tal como aparece en la figura 1.20(c). De esta manera se conectan propiedades de transformación del hamiltoniano con las propiedades estadísticas del sistema.

La entropía K es una medida de qué tan rápido se alejan dos órbitas inicialmente muy cercanas al transcurrir el tiempo. Sea l la distancia entre las dos trayectorias al tiempo t y l' la distancia de tales órbitas al tiempo $t+\epsilon$, la entropía K se define entonces como {11}:

2.180

$$K = \overline{\lim_{I \rightarrow 0} \text{Ln}(\bar{\Gamma}/I)} \quad \text{caso discreto}$$

$$K = \overline{\lim_{T \rightarrow 0} \left((1/T) \text{Ln}(\bar{\Gamma}/I) \right)} \quad \text{caso continuo}$$

Todo sistema K tiene una entropía K positiva, diferente de cero. Esto da por resultado que dos órbitas contiguas (muy cercanas) se alejarán exponencialmente al transcurrir el tiempo:

2.190

$$l_t = l_0 e^{Kt}$$

Entonces, un sistema con entropía K positiva será necesariamente inestable, ya que una pequeña variación en las condiciones iniciales conducirá a comportamientos muy distintos del sistema al transcurrir el tiempo.

Un sistema C se define como aquel sistema cuyo mapeo debido al propagador hamiltoniano es un difeomorfismo C (2). Este difeomorfismo significa que cualquier volumen en el espacio fase G tendrá una dirección en la cual se contraerá exponencialmente y otra dirección en la que se expandirá exponencialmente, conservando naturalmente la medida del volumen. Dicho en otra forma, el volumen se "estirará" como una goma de mascar al transcurrir el tiempo, tal como lo podemos ver en la figura 2.10.

Debemos señalar que cualquier volumen de G llenará densamente a G rápidamente, ya que se estira en forma exponencial. Por esta razón un sistema C tiene entropía K positiva y además es sistema K. Si el propagador hamiltoniano tuviera algún punto fijo (tal que al tiempo t+T regrese al punto inicial) éste será repulsivo, tal como se requiere en un sistema con propiedades estadísticas.

g) Azar en Sistemas Mecánicos

Para demostrar que un sistema mecánico se comporta azarosamente en cualquier hipersuperficie L de G, bastaría demostrar solamente que tiene entropía K positiva y es por lo tanto un sistema C. Ya no tendríamos que verificar que toda sucesión en la hipersuperficie fuera oo-distribuida y que toda subsecuon fuera al menos distribuida uniformemente. El examinar numéricamente el comportamiento

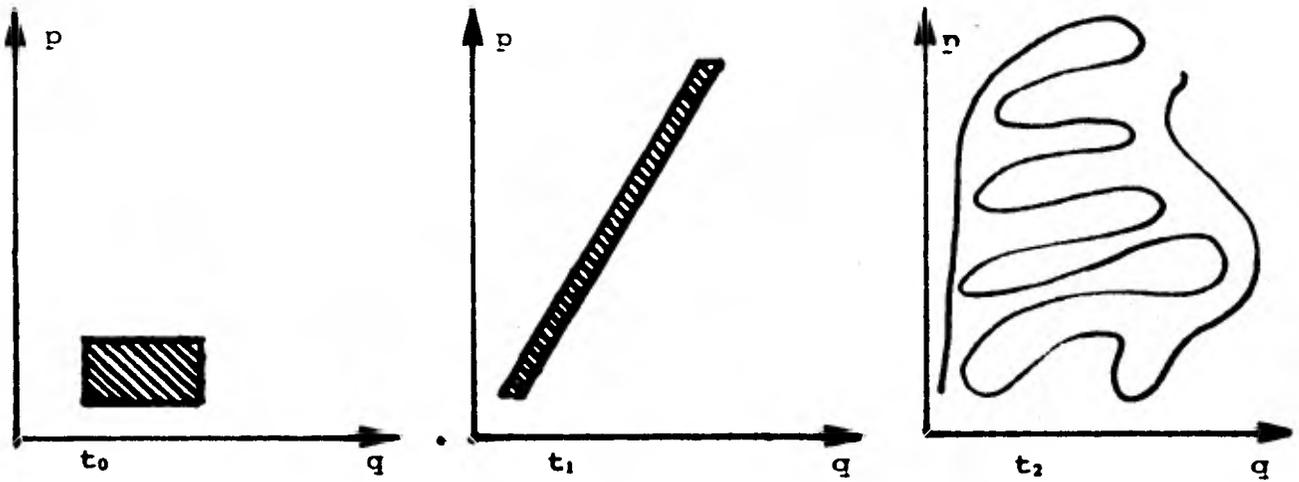


Figura 2.10

de dos órbitas inicialmente muy cercanas nos podrá dar un indicio de si la entropía K es positiva o cero. Por lo tanto el calcular numéricamente las órbitas del sistema será un método de estudio de las propiedades estadísticas de sistemas mecánicos siempre y cuando podamos señalar si el sistema tiene propiedades de sistema C.

En el siguiente capítulo utilizaremos los conceptos desarrollados en la teoría ergódica para estudiar las propiedades estadísticas de osciladores anarmónicos.

3. Análisis de algunos Sistemas Mecánicos con Propiedades Estadísticas

En este capítulo nos dedicaremos a estudiar cómo surge la estocasticidad en osciladores anarmónicos, lo cual es un buen ejemplo para mostrar la utilización de la teoría ergódica para la detección de estocasticidad. Mostraremos paso a paso las condiciones para las cuales los osciladores anarmónicos van de un comportamiento determinista a uno azaroso sobre los planos de corte. La importancia de utilizar al oscilador anarmónico como ejemplo reside en que gran número de problemas físicos se pueden reducir a un sistema de osciladores no lineales.

Dentro de este capítulo introduciremos un teorema fundamental en el estudio de sistemas cuasi-periódicos, el teorema de Kolgomorov-Arnold-Moser (KAM), el cual está orientado a determinar cuando un sistema es estable.

Los ejemplos son esencialmente cálculos numéricos sobre osciladores no lineales, ya que calcular en forma exacta o aproximada las soluciones de las ecuaciones de movimiento es muy complicado (o no se conoce su solución). Así, la intención de este capítulo es ejemplificar con sistemas específicos la teoría ergódica discutida en los capítulos anteriores y desarrollar la teoría sobre osciladores no lineales que se utilizará en el siguiente capítulo.

a) El oscilador anarmónico

Consideramos desde el inicio de esta tesis que el tipo de fenómenos físicos que nos interesan son aquellos con energía limitada y confinados a una región del espacio. Esto quiere decir que los sistemas estarán confinados a una región del espacio fase G . El teorema del retorno de Poincaré (8) asegura que tales sistemas son cuasiperiódicos. Si agregamos a nuestras hipótesis la conservación de la energía total podemos representar a nuestro sistema como un conjunto de osciladores no lineales acoplados. Por lo tanto, todo sistema mecánico conservativo en la energía y confinado a una región del espacio puede representarse como un sistema de osciladores no lineales acoplados.

Empezaremos con el sistema de osciladores acoplados, cuyo hamiltoniano general, para $2N$ grados de libertad es:

3.010

$$H = \sum_{j=1}^N a_j p_j^2 + \sum_{j=1}^N b_j q_j^4 + \sum_{i,j,k} c_{ijk} q_i q_j q_k + \dots$$

En esta ecuación, el hamiltoniano no tiene términos lineales por ser un sistema cuasiperiódico li-

mitado en el espacio. Podemos simplificarlo gracias a la simetría de los elementos cuadráticos, tal que $a_{ij} = a_{ji}$ y $b_{ij} = b_{ji}$, entonces existe una transformación que diagonaliza simultáneamente las matrices $[a_{ij}]$ y $[b_{ij}]$ (8). Así H lo expresamos como:

3.020

$$H = \sum_i^N (1/2m_i)p_i^2 + \sum_i^N w_i^2 q_i^2 + \sum_{i \neq k}^N c_{ijk} q_i q_j q_k + \sum_{i \neq k}^N d_{ijk} q_i q_j q_k q_l + \dots$$

En esta ecuación notamos claramente que los dos primeros términos representan un sistema de N osciladores armónicos, cada uno de masa m_i y frecuencia w_i , y los demás términos representan la parte no lineal.

Cuando los coeficientes c_{ijk}, d_{ijk}, \dots son arbitrariamente pequeños, tal que:

3.030

$$\text{máximo}(c_{ijk}, d_{ijk}, \dots) < \epsilon \ll 1$$

Entonces podemos considerar que el hamiltoniano se puede dividir en dos partes, una lineal (oscilador armónico) y otra no lineal, que designaremos como perturbadora, con un parámetro de acoplamiento ϵ muy pequeño, quedando:

$$H = H_0 + \epsilon H_1$$

3.040

Para cada oscilador armónico en H_0 , la parte perturbativa (ϵH_1) está compuesta por términos cúbicos y de mayor orden en las coordenadas q_i . Al transcurrir el tiempo, el comportamiento global que tienen las demás coordenadas en ϵH_1 sobre el oscilador armónico i -ésimo, es equivalente al de una función cuasiperiódica en el tiempo {12}. Por tal razón cada oscilador armónico se verá perturbado por una función cuasiperiódica que depende de la coordenada q_i y del tiempo. Entonces, el hamiltoniano 3.020 se separa en N ecuaciones de osciladores no lineales desacoplados:

3.050

$$H = p_1^2 + w_1^2 q_1^2 + \epsilon F_1(q_1, t)$$

$$H = p_2^2 + w_2^2 q_2^2 + \epsilon F_2(q_2, t)$$

.

.

.

$$H = p_N^2 + w_N^2 q_N^2 + \epsilon F_N(q_N, t)$$

Las F_i son funciones cuasiperiódicas en el tiempo y dependientes también de la coordenada q_i . No siempre es posible desacoplar las ecuaciones como en 3.050, solamente lo es cuando el sistema de osciladores cumple ciertas condiciones en sus frecuencias no perturbadas. El propósito de los siguientes párrafos es determinar tales condiciones.

A partir de aquí, sólo consideraremos aquellos sistemas que cumplan las características arriba descritas, por lo cual nos limitaremos al estudio de un solo oscilador no lineal perturbado. Todas las propiedades que encontremos para un solo oscilador las podemos aplicar al sistema 3.050 y así serán heredadas al sistema de N osciladores en 3.020.

Partamos entonces del siguiente hamiltoniano 3.050, que tiene la forma de la ecuación 3.040:

3.050

$$H = p^2 + w^2 q^2 + \epsilon F(q, t)$$

En la parte del hamiltoniano no perturbado, H_0 , además del término de oscilador armónico incluiremos los términos que tengan cambios muy lentos en el tiempo (en comparación con el período del oscilador armónico). Estos términos los llamamos adiabáticos, los cuales dan origen en ciertos casos a los llamados invariantes adiabáticos {13}. Mediante una transformación canónica de coordenadas rectangulares a las de ángulo y acción {14}, se logra aislar una constante de movimiento si sólo se considera la parte no perturbada del hamiltoniano 3.050, la cual es precisamente la acción (ya que H_0 no depende del ángulo). Por ello es más conveniente redefinir a H_0 como la parte del hamiltoniano total que no depende de la coordenada angular. Esto lleva implícito que H_0 contenga la parte de oscilador armónico y los términos adiabáticos ordenados de tal forma que representen invariantes adiabáticos (asimismo H_0 representa una integral de movimiento, que es la energía).

Al transformar el sistema 3.050 a coordenadas de ángulo y acción, tendremos N integrales de movimiento. Las acciones I_1, I_2, \dots, I_N son constantes cuando $H=H_0$. Utilizando las ecuaciones de Hamilton tenemos:

$$\dot{I}_i = (\partial H_0(I)/\partial I_i) = 0 \Rightarrow I_i = \text{Cte.}$$

$$\dot{\theta}_i = -(\partial H_0(I)/\partial I_i) = f_i(I) = \text{Cte.}$$

3.070

$$\theta_i = f_i(I)t + \text{Cte.}$$

El ángulo es una función lineal en el tiempo.

Como tenemos N constantes de movimiento uniformes en 3.070 (las constantes de movimiento uniformes F son funciones de G a los reales, que cumplen la relación $F(q,p)=cte$, son univaluadas, conmuta con el hamiltoniano, $\{F,H\}=0$, y que no dependen explícitamente de las condiciones iniciales) la región donde estarán las órbitas en G será una hipersuperficie de dimensión N . Como el sistema en 3.070 es periódico, podemos representar al espacio fase como un toroide de dimensión N , donde los radios del toroide son las acciones. Las órbitas serán entonces trayectorias sobre el toroide. En la figura 3.10 mostramos un toroide para un sistema de 4 dimensiones. La posición en el toroide queda determinada por los ángulos θ_1 y θ_2 .

Como las órbitas en el toroide dependen únicamente de las coordenadas angulares, un punto en el toroide queda representado como:

$$x = [(\theta_1 \text{ mod } w_1, \dots, (\theta_N \text{ mod } w_N)]$$

3.080

Se demuestra, por el teorema de Jacobi {2}, que cuando las frecuencias cumplen la ecuación 3.080 la órbita es cerrada

$$\sum_{i=1}^N n_i w_i = 0$$

3.090

En otro caso, la órbita llenará densamente el toroide implicando que el sistema es ergódico {2, 3}. El teorema de Hopf {7} nos permite hablar de ergodicidad en la superficie del toroide, ya que está definido por N integrales de movimiento aisladas o algebraicas.

Consideremos ahora la perturbación en H , la cual depende del ángulo, la acción y del tiempo. Consideremos que la dependencia en el tiempo es del tipo periódico con una frecuencia comparable a la del sistema no perturbado w_i (H_1 no contiene términos adiabáticos).

Para ejemplificar las ideas que desarrollamos en esta sección, tomemos un sistema simple, la interacción de tres cuerpos de igual masa (unidad) en ausencia de campos externos. El hamiltoniano queda escrito así:

$$H = (1/2)(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) + V(q_1 - q_2)$$

3.100

$$+ V(q_1 - q_3) + V(q_2 - q_3)$$

Las interacciones entre partículas son iguales. Desarrollando en serie de potencias el potencial V

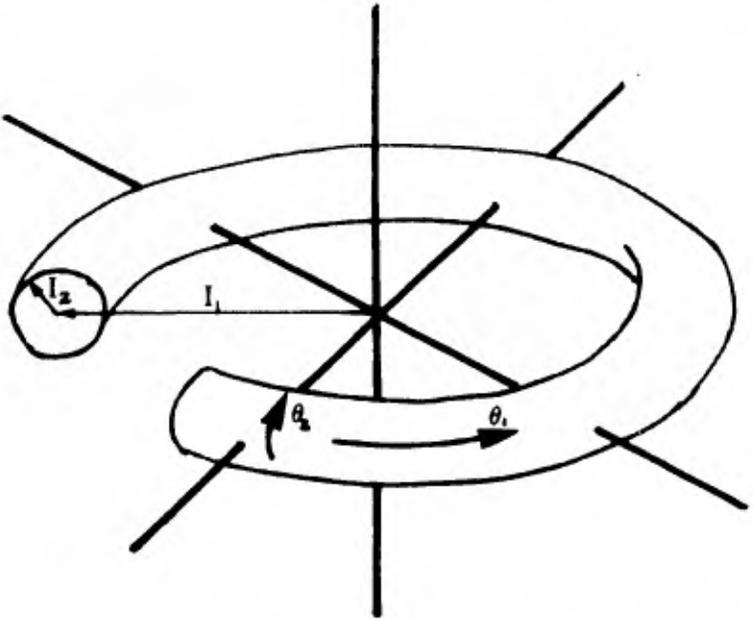


Figura 3.10

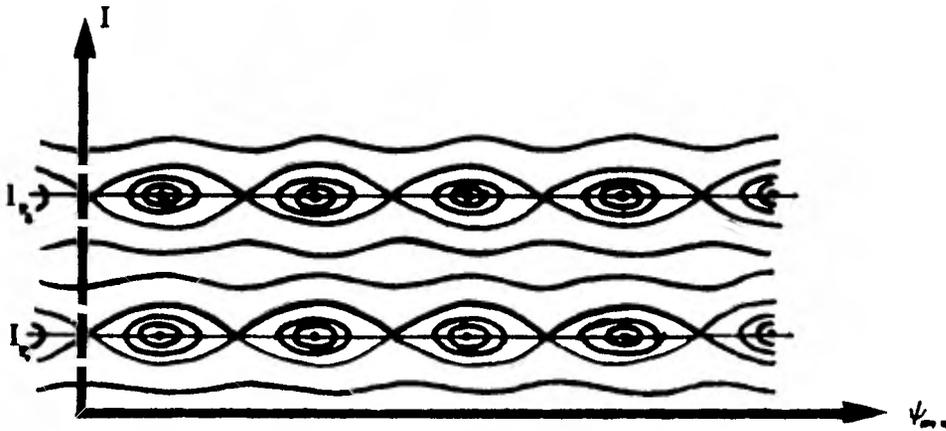


Figura 3.20

hasta orden cúbico:

$$\begin{aligned}
 3.110 \quad H = & (1/2)[p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + (q_2 - q_3)^2 \\
 & + (q_2 - q_1)^2 - (\alpha/3)[(q_1 - q_3)^3 \\
 & + (q_2 - q_1)^3 + (q_3 - q_2)^3]
 \end{aligned}$$

El hamiltoniano 3.110 tiene dos integrales aisladas {10,15}, por lo cual el sistema se puede reducir de uno de seis a uno de cuatro grados de libertad. De esta forma llegamos al hamiltoniano 3.120 conocido como hamiltoniano de Hénon:

$$\begin{aligned}
 3.120 \quad H = & (1/2)[p_1^2 + p_2^2 + q_1^2 + q_2^2] \\
 & + q_1^2 q_2 - (1/3)q_2^3
 \end{aligned}$$

En términos de coordenadas de ángulo y acción tal hamiltoniano queda transformado como:

$$\begin{aligned}
 3.130 \quad H = & 2(I_1 + I_2) + (8/I_2)^{1/2}(2I_1 \cos^2 \theta_1 \cos \theta_2 \\
 & - (1/3)I_2 \cos^3 \theta_2)
 \end{aligned}$$

El primer término en el hamiltoniano 3.130 es H_0 y el segundo la perturbación.

El hamiltoniano 3.120 lo seguiremos examinado en las siguientes secciones, en las cuales estudiaremos las propiedades de la parte perturbativa de los osciladores no lineales. Discutiremos como surgen las resonancias en la parte no lineal del hamiltoniano y sus efectos en las propiedades estadísticas del oscilador.

b) Resonancias en los Osciladores y la Ecuación Universal

La parte no perturbada del hamiltoniano 3.040 está caracterizada por un toroide, definido por el valor de las acciones; así, sus propiedades quedan definidas por esos parámetros. Lo que toca ahora es identificar las propiedades del término perturbado y qué relación guarda con la inestabilidad del sistema.

El concepto de resonancia u oscilador pequeño es el punto clave en el comportamiento azaroso del sistema. Encontraremos las condiciones para que el sistema posea una resonancia y elaboraremos una ecuación de movimiento más simplificada que llamaremos "ecuación universal".

Partamos del hamiltoniano 3.040. Al transformarlo a coordenadas de ángulo y acción la parte no perturbada está en función del ángulo, la acción y del tiempo:

$$3.140 \quad H = H_0(I) + \epsilon H_1(I, \theta, t)$$

El parámetro δ representa la fase de la fuerza externa que se aplica al sistema, que es una función periódica en el tiempo con frecuencia Ω . Las ecuaciones de Hamilton quedan escritas como:

$$3.150 \quad \dot{\theta} = \partial H / \partial I = w(I) + \epsilon (\partial H_1 / \partial I)$$

$$3.160 \quad \dot{I} = -\partial H / \partial \theta = -\epsilon \partial H_1 / \partial \theta$$

Desde un principio supusimos que ϵ era muy pequeño, es decir, I será casi cero y por lo tanto la acción variará muy lentamente (en comparación de los periodos $2\pi/w$ y $2\pi/\Omega$). Asimismo $w(I)$ puede considerarse constante y es, como vimos anteriormente, la frecuencia del sistema no perturbado.

Por ser periódico H en los parámetros θ y δ , podemos hacer un doble desarrollo en serie de Fourier de H_1 {14,16}:

$$3.170 \quad H_1(I, \theta, t) = \sum_{m, n} V_{mn}(I) \cos(m\theta + n\delta)$$

En primera aproximación elijeremos un solo término de la doble serie (cuyo coeficiente sea el mayor). De esta forma tenemos un hamiltoniano más simplificado (pero aproximado):

$$3.180 \quad H = H_0(l) + \epsilon V_{nm}(l) \cos(m\theta + n\zeta')$$

y las ecuaciones 3.150 y 3.160 se reduce:

$$3.190 \quad \dot{\theta} = w(l) + \epsilon (\partial V_{mn} / \partial l) \cos(m\theta + n\zeta')$$

$$3.200 \quad \dot{l} = \epsilon m V_{mn}(l) \sin(m\theta + n\zeta')$$

Aunque ϵ es pequeño integraremos l como:

$$3.210 \quad l = \int \dot{l} dt + l_0$$

Sustituyendo por su valor a l en 3.210:

$$3.220 \quad \dot{l} = \epsilon \int^t m V_{mn}(l) \sin(m\theta + n\zeta') dt + l_0$$

Esta es una ecuación integral, pero para obtener una expresión aproximada, consideremos a l como constante (apoyándonos en la ecuación 3.180). Solamente θ y ζ son funciones del tiempo, así que al integrar tenemos la siguiente solución:

3.230

$$I = I_0 - \frac{\epsilon m V_{mn}(I_0) \cos(m\theta + n\phi)}{mw(I) + n\Omega}$$

Ω y w son, en primera aproximación, constantes. Debemos observar que la I en 3.230 será casi igual a I_0 y constante en el tiempo siempre y cuando ϵ sea pequeño y que el denominador no tienda a cero.

En algunas ocasiones, la frecuencia $w(I)$ cumple la relación:

3.240

$$mw(I) + n\Omega \ll \epsilon$$

Cuando esto ocurre decimos que $w(I)$ es una frecuencia de resonancia. Tal tipo de frecuencia da por resultado que el valor absoluto de la acción crezca enormemente debido al denominador pequeño, ocasionando que la órbita del sistema se aleje del toroide definido para el sistema no perturbado. Para los demás casos, las órbitas estarán muy cercanas al toroide; sólo las resonancias hacen significativo el término H_1 del hamiltoniano 3.140, no importando qué tan pequeño sea ϵ , siempre y cuando se cumpla la relación 3.240 (11,17). Este fenómeno resulta similar al oscilador armónico forzado, en donde existe resonancia al coincidir la frecuencia de la fuerza externa y la frecuencia natural del oscilador (13).

En el desarrollo en series de Fourier 3.170, seleccionamos un solo término que consideramos significativo. Sin embargo otros términos pueden dar por resultados resonancias; entonces debemos seleccionar de la serie de Fourier los términos resonantes y desechar a los demás.

Como la frecuencia depende de la acción, $w=w(I)$, llamaremos acción resonante I_r a aquella que cumpla con la ecuación 3.240. Desarrollemos ahora, en el hamiltoniano 3.180, el término H_1 en serie de potencias alrededor de I_r , además hagamos el siguiente cambio de variable en el ángulo:

$$\psi_{mn} = m\theta + n\phi$$

3.250

$$\dot{\psi}_{mn} = mw(I) + n\Omega$$

El término H en serie resulta ser:

3.260

$$H_0 = H_0 + (\partial H_0 / \partial I) (I - I_r) + (\partial^2 H_0 / \partial I^2) (I - I_r)^2 + \dots$$

Por las ecuaciones de Hamilton encontramos que el segundo término en el desarrollo es nulo, ya que:

3.270

$$\dot{\psi}_{mn} \Big|_{I_r} = (\partial H_0 / \partial I)_{I_r} = m\omega(I) + n\Omega = 0$$

Cortando el desarrollo con el término cuadrático y renormalizando la energía para eliminar el término constante $H_0(I_r)$, el hamiltoniano 3.180 lo expresamos simplemente como "la ecuación universal" {12}:

3.280

$$H = (n/2)w(I_r)\Delta I^2 + \epsilon V_{mn}(I_r)\cos\psi_{mn}$$

siendo:

3.285

$$w(I_r) = (\partial w / \partial I)_{I_r} = (\partial^2 H_0 / \partial I^2)_{I_r}$$

$$\Delta I = (I - I_r)$$

Esta ecuación resulta ser muy parecida a la del péndulo. Debemos interpretar esta forma del hamiltoniano 3.280 como la oscilación del valor de la frecuencia del caso no perturbado. Si la frecuencia del sistema es muy próxima a la resonante sucede un fenómeno de oscilación de esa frecuencia alrededor de la frecuencia no perturbada, pero bajo ciertas condiciones puede escapar la frecuencia del estado de oscilación. Para unos casos la órbita es cerrada y en otros casos no, como se ilustra en la figura 3.20. La ecuación de las órbitas son, a partir del hamiltoniano 3.280:

3.290

$$I = \sqrt{(2/w)[H - \epsilon V_{mn}(I_r)\cos\psi_{mn}]} + I_r$$

Cuando el módulo de la perturbación es mayor que H:

3.300
$$H < |eV_{mn}(I_r)|$$

la órbita es cerrada (recuérdese que H representa a la energía total).

Así, a energías muy bajas la frecuencia oscilará muy cerca de la frecuencia no perturbada. Si la energía es mayor, tal que:

3.310
$$H > |eV_{mn}(I_r)|$$

la órbita escapa de la oscilación, volviéndose una órbita abierta.

La órbita llamada separatriz está determinada por:

3.320
$$H = |eV_{mn}(I_r)|$$

la cual delimita a las órbitas abiertas y las cerradas.

Es, entonces, predecible que bajo la condición 3.310 la órbita que corresponde al hamiltoniano 3.180 se aleja en forma indefinida del toroide. Entonces, si deseamos examinar el comportamiento estadístico de los osciladores, la región definida por 3.310 será la de mayor interés para nosotros.

El valor máximo permitido a I bajo el régimen de oscilación en la ecuación 3.290 es:

3.330
$$\Delta I_r = 4 \sqrt{eV_{mn}/\omega}$$

La máxima variación en la frecuencia en la oscilación, Δw_f , es:

$$3.340 \quad \Delta w_f = w \Delta I_f = 4 \sqrt{6w V_{mn}}$$

La mejor manera de observar lo que sucede en el espacio fase cuando existen resonancias es por medio de dos ejemplos. Ambos fueron calculados numéricamente por J. Ford y nos muestran gráficamente el comportamiento de las resonancias en un plano de corte.

Pensemos en un sistema de cuatro grados de libertad y expresemos su hamiltoniano en coordenadas de ángulo y acción:

$$3.345 \quad H = I_1 + I_2 - 3I_1I_2 + I_1^2 + I_2^2 + 4I_1I_2 \cos[2(\theta_1 - \theta_2)]$$

donde identificamos a H_0 y H_1 como:

$$3.350 \quad H_0 = I_1 + I_2 - 3I_1I_2 + I_1^2 + I_2^2$$

$$3.360 \quad H_1 = I_1I_2 \cos[2(\theta_1 - \theta_2)]$$

Las frecuencias de oscilación del sistema no perturbado son:

$$3.370 \quad w_1 = \dot{\theta}_1 = 1 + 2I_1 - 3I_2$$

$$w_2 = \dot{\theta}_2 = 1 - 3I_1 + 2I_2$$

El hamiltoniano 3.345 puede ser desacoplado, como en el sistema 3.050, resultando:

$$3.380 \quad H_0 = I_1 + I_2^2 + 4I_1 \text{Acos}[2\theta_1 - \theta_2]$$

$$3.390 \quad H_b = I_2 + I_2^2 + \epsilon I_2 B \cos[\zeta_b - 2\theta_2]$$

El significado de ζ_a y de ζ_b es el de los ángulos θ_2 y θ_1 respectivamente, sólo que le hemos cambiado de nombre para recalcar la idea de ver el acoplamiento entre osciladores como una fuerza externa de fase ζ .

Si comparamos 3.380 y 3.390 con 3.180, encontremos que existirá resonancia cuando m y n satisfacen 3.240, o sea:

$$3.400 \quad 2w_1 = 2w_2 \quad \text{o} \quad I_1 = 5I_2$$

Si observamos un plano de corte (o sea una hipersuperficie) de G definido por $\theta_1 = 3\pi/2$ y la integral de movimiento $J = I_1 + I_2$ y $w_1 = w_2$, veremos (figura 3.30) que las dos pequeñas miniórbitas cerradas que surgen son debidas a la resonancia 2-2 (llamada así porque en 3.380 y 3.390, el valor de n es 2 en ambos casos). Al aumentar la energía, las órbitas se alejan más y más de lo que serían en el caso no perturbado. Las pequeñas "elipses" siempre aparecen, no importando qué tan pequeña sea la energía del sistema.

Como segundo ejemplo, cambiaremos en 3.345 la parte perturbativa, tal que H_1 sea:

$$3.410 \quad H_1 = I_1 I_2^{3/2} \cos(2\theta_1 - 3\theta_2)$$

Usando el mismo procedimiento que en el ejemplo anterior, desacoplamos el hamiltoniano en los términos:

$$3.420 \quad H_a = H_0(I_1) + \epsilon I_1 A \cos(2\theta_1 - \zeta_a)$$

$$H_b = H_0(I_2) + \epsilon I_2^{3/2} B \cos(\zeta_b - 3\theta_2)$$

entonces, habrá resonancia cuando

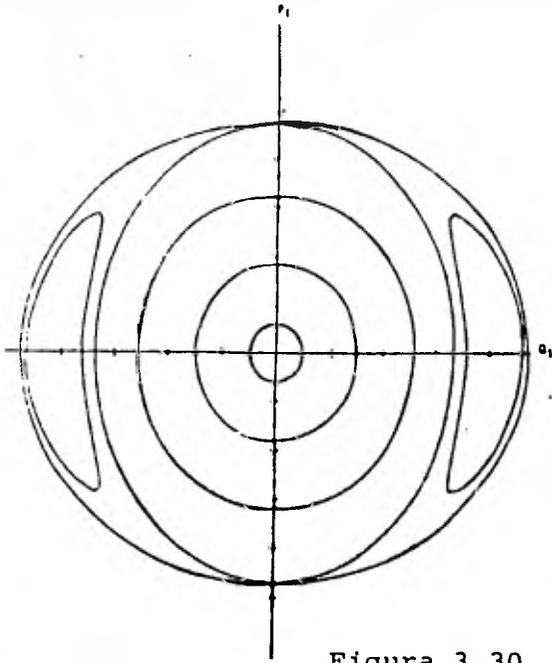


Figura 3.30

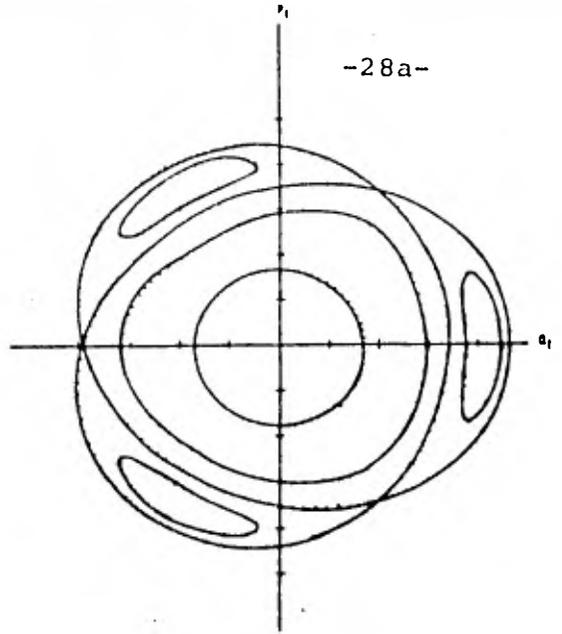


Figura 3.40

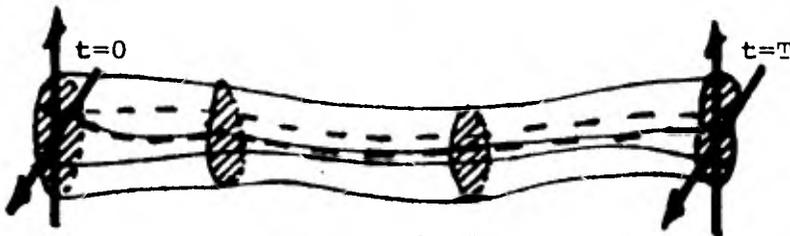


Figura 3.35

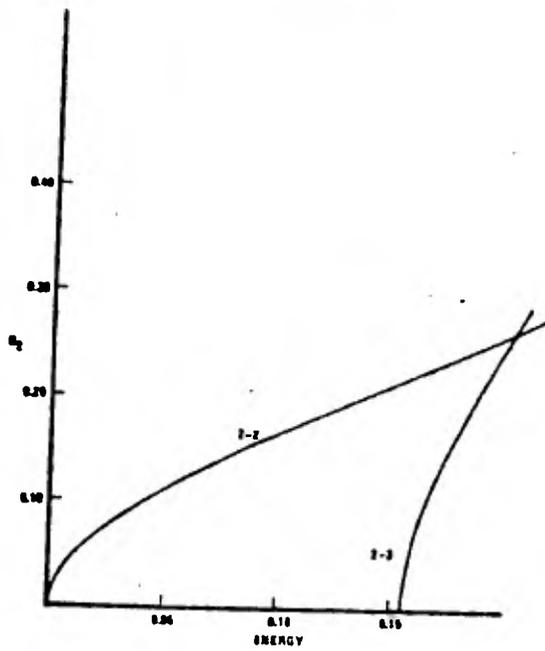


Figura 3.50

3.430

$$2\omega_1 = 3\omega_2$$

A esta resonancia la llamamos 2-3.

Graficando un plano de corte en G , definido por $\theta_1 = 3\pi/2$, $J = 3I_1 + 2I_2$ y con la condición de resonancia 3.430, tenemos la figura 3.40. Las tres miniórbitas cerradas pequeñas sólo surgen cuando la energía es mayor que cierto valor.

Con estos dos ejemplos entendemos ahora que cuando hay resonancia el sistema se comportará muy diferente al caso no perturbado. Esperamos por otro lado que cuando no exista perturbación, el sistema no se aleje indefinidamente del toroide definido por H_0 . En la siguiente sección discutiremos qué propiedades tendrá un sistema no resonante y sus implicaciones relativas a la estabilidad del sistema.

c) Estabilidad y Teorema de KAM

Cuando en mecánica decimos que un sistema es estable, estamos pensando que ante una ligera perturbación al sistema, ya sea en las condiciones iniciales o en el potencial, las soluciones de las ecuaciones de movimiento del sistema perturbado serán muy parecidas a las no perturbadas, tal estabilidad se conoce como estabilidad de Liapunov.

En forma gráfica, podemos decir que un sistema es estable si las órbitas que se encuentran cercanas al tiempo $t=0$, se mantienen cercanas para todo tiempo, como si estuvieran encerradas en un tubo como en la figura 3.35.

En general es difícil determinar si un sistema es estable si no se conoce en forma exacta la solución de sus ecuaciones de movimiento. Hasta hace algunos años era un misterio el conocer la estabilidad de sistemas no lineales. El teorema de KAM resolvió este misterio determinando las condiciones necesarias bajo las cuales un sistema es estable.

El teorema de KAM se define, según Moser [18] de la siguiente manera. Considérese un sistema con el siguiente hamiltoniano:

3.440

$$H = H_0(I) + \epsilon [H_1(I, \theta) + \dots]$$

donde ϵ es el parámetro de acoplamiento.

H se supone una función real y analítica en todas sus variables y las $H_k(I, q)$ son funciones periódicas para todo k diferente de cero; además todas las trayectorias del hamiltoniano 3.440 están restringidas a una hipersuperficie de dimensión $(2N-1)$ de energía constante. Para $\epsilon=0$, las órbitas del sistema están sobre un toroide de dimensión $(N-1)$. Supóngase que las frecuencias del sistema no perturbado ($\epsilon=0$) cumplen las siguientes condiciones:

I) Son racionalmente independientes

II) Satisfacen un número infinito de desigualdades

$$3.445 \quad \left| \sum_k n_k w_k \right| \geq |n|^{-\gamma}$$

Para todos los enteros n , con

$$3.446 \quad \left| n \right| = \sum_k |n_k| > 0$$

donde c y γ son constantes positivas.

III) El determinante:

$$3.447 \quad \det \begin{bmatrix} \partial w_j / \partial t_k & w_j \\ w_k & 0 \end{bmatrix} = 0$$

Si estas tres condiciones se satisfacen, entonces casi todas las soluciones del hamiltoniano 3.440 serán cuasiperiódicas y estarán muy cercanas al toroide original, siempre y cuando ϵ sea pequeño. En otras palabras, la solución a las ecuaciones de Hamilton del hamiltoniano 3.440 pueden escribirse en términos de funciones analíticas $f = f(w, \theta, \epsilon)$ que son periódicas en θ .

Este teorema depende "crucialmente" de la no existencia de frecuencias resonantes.

Si un sistema presenta propiedades estadísticas, su comportamiento debe ser independiente de las condiciones iniciales. Tal independencia se logra sólo cuando el sistema es inestable, de otra manera los resultados de un sistema azaroso bajo condiciones iniciales semejantes resultarán casi iguales, lo que es una contradicción.

De esta manera, si queremos investigar las propiedades estocásticas de un sistema debemos asegurarnos primero que viola las hipótesis del teorema de KAM.

d) Inestabilidad y Azar

En las secciones pasadas determinamos el concepto de resonancia en osciladores no lineales y las condiciones de estabilidad. Con estos elementos discutiremos cómo surge la inestabilidad en los osciladores y de ahí la estocasticidad en el sistema.

Si el teorema de KAM asegura estabilidad cuando el sistema no posee frecuencias resonantes, entonces un requisito para tener un sistema inestable es tener frecuencias resonantes. Además pedimos que sean resonancias de orden bajo, o sea, la suma del valor absoluto de las n debe ser menor a cierta cota:

3.448
$$\sum_{i=1}^n n_i w_i < c | \eta |^{-\gamma}$$

Mientras más grandes sean el valor de la energía o el parámetro de acoplamiento, estará el sistema en mejor condición de ser inestable. Sin embargo no es una condición necesaria para la inestabilidad y por ello ni para la estocasticidad {17}.

En la sección b) mostramos ejemplos de osciladores con una resonancia. Su comportamiento, visto a través de sus gráficas (figuras 3.30 y 3.40), es suave, ya que la órbita es cerrada. Intuitivamente notamos que estos sistemas no son lo suficientemente inestables como para ser independientes de las condiciones iniciales. Empezaremos entonces una discusión sobre sistemas con dos o más resonancias y observaremos como existe una energía crítica en los ejemplos tal que, cruzando ese umbral, el sistema se vuelve altamente inestable y estocástico. Los ejemplos son nuevamente del tipo numérico, ya que por el tipo de soluciones que se obtienen, no existe ninguna solución analítica suave.

Antes de entrar a los ejemplos, introduciremos el parámetro de no linealidad de sistemas oscilantes {11}. Este se define como:

3.450
$$\alpha = \left| (1/w)(\partial w / \partial I) \right|$$

En un sistema lineal α es cero ya que w no es función de I , pero en osciladores no lineales α es diferente de cero y tendrá un valor mayor mientras el sistema sea más inestable. Esto significa que cuando el sistema es inestable la frecuencia dependerá fuertemente de la acción, ya que oscilará alrededor de la frecuencia no perturbada (frecuencia de fase). A medida que la amplitud de oscilación aumenta, las órbitas en la figura 3.20 se acercarán más a la separatriz, la cual está caracterizada por la condición 3.320. Utilizando el parámetro de no linealidad, las relaciones que describen el ancho máximo de oscilación de la acción y la frecuencia (ecuaciones 3.330 y 3.340) quedan así {11}:

3.460

$$\Delta l_r / l_r = \sqrt{\epsilon V_{mn} / \omega l_r}$$

3.470

$$\Delta \omega_r / \omega_r = \sqrt{\epsilon \omega V_{mn} / \omega l_r}$$

Observamos que cuando ϵ crece el ancho de la amplitud de la frecuencia crece, lo que concuerda con la discusión hecha arriba.

Una condición interesante es cuando existe traslape de resonancia, esto es, cuando las oscilaciones de fase de dos frecuencias resonantes se traslapan. Es como si en la figura 3.20 las elipses superiores se traslaparan con las inferiores. La condición para que esto se cumpla es la siguiente. Si ω_i y ω_{i+1} son dos frecuencias resonantes consecutivas, llamaremos Δ a la diferencia entre ellas:

3.480

$$\Delta = |\omega_{i+1} - \omega_i|$$

Si Δ es menor que $\Delta \omega_i$, significa que las órbitas de las oscilaciones de fase se traslapan; así el parámetro S medirá el traslape:

3.490

$$S = \Delta \omega_i / \Delta$$

Si S es menor que 1, las separatrices de ambas frecuencias no se cruzan, en cambio si S es mayor que 1 las separatrices se tocarán (traslape). A este parámetro S se le conoce como parámetro de estocasticidad (S mayor que 1 implica estocasticidad.) Normalmente, el parámetro S es función de la energía del sistema. Cuando $S=1$ tenemos el umbral de energía para lograr estocasticidad. Sin embargo, en ciertos sistemas S es independiente de la energía (17), estableciendo que el sistema es estocástico a energías muy bajas, aun tendiendo a cero.

Hemos hablado de estocasticidad y sin embargo no la hemos mostrado. Por medio de los eigenfrentes dos ejemplos introduciremos la conexión entre inestabilidad y estocasticidad. Los ejemplos fueron calculados numéricamente por J. Ford (14) y Hénon (10). Aquí mostraremos sus resultados.

El primer ejemplo se refiere a estudiar lo que sucede en el traslape de resonancias. Empezamos

con un hamiltoniano no perturbado igual a la ecuación 3.350, agreguémosle las dos perturbaciones que se encuentran en las ecuaciones 3.360 y 3.410, así tendremos el hamiltoniano:

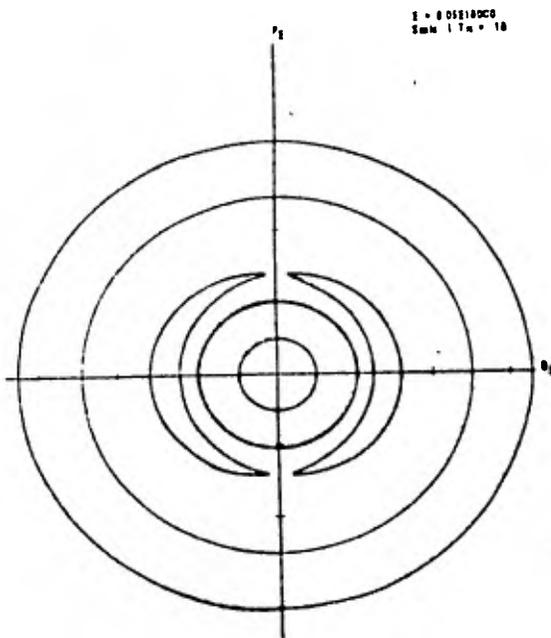
$$\begin{aligned}
 H = & I_1 + I_2 - I_1^2 - 3I_1I_2 + I_2^2 \\
 3.500 \quad & + \left[I_1I_2 \cos[2(\theta_1 - \theta_2)] \right. \\
 & \left. + I_1I_2^{3/2} \cos[2\theta_1 - 3\theta_2] \right]
 \end{aligned}$$

Aquí tenemos resonancias 2-2 y 2-3. Habíamos dicho en la sección anterior que el hamiltoniano 3.340 presenta en su gráfica, figura 3.30, dos pequeñas órbitas cerradas para cualquier valor de la energía. En cambio, cuando consideramos la perturbación con una resonancia 2-3, en la gráfica en el plano de corte, figura 3.40, surgirán tres pequeñas órbitas cerradas para energías mayores a cierto umbral. La posición de estas órbitas cerradas depende de la energía y en la figura 3.50 presentamos una gráfica entre posición (coordenada q_2 en el plano de corte) y la energía para cada tipo de resonancia. Esperamos que para el cruce de las dos curvas en la figura 3.50 se tenga traslape de resonancias (14). En la figura 3.60 presentamos una secuencia de gráficas del plano de corte definido por p_2 y q_2 fijando $\theta_1 = 3\pi/2$. La energía en la parte (a) de la figura es menor a la necesaria para que aparezca la resonancia 2-3; en la parte (b) se nota ya la resonancia 2-3 junto con la 2-2. En la parte (c), ya muy cerca del traslape, aparecen nuevas órbitas cerradas pequeñas alrededor de las resonancias 2-2 y 2-3. En la última figura estamos en el traslape de resonancia: las pequeñas elipses se han convertido en puntos erráticos sobre el plano de corte y no presentan ningún patrón de aparición.

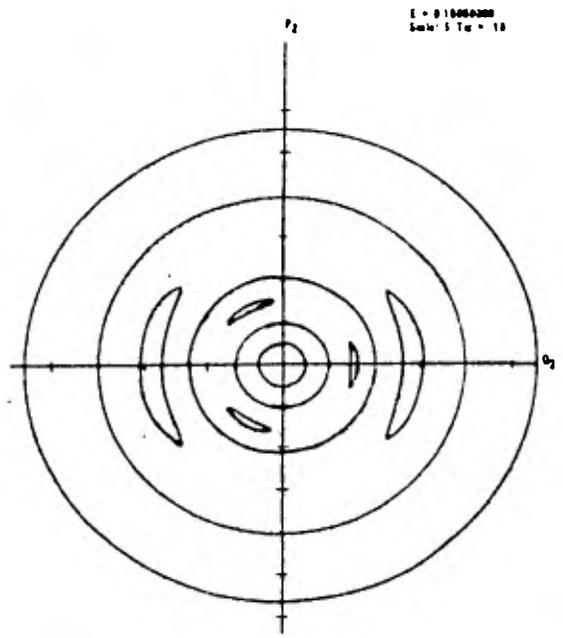
Para energías mayores, el área que ocupan estos puntos erráticos es más extensa. Cualquier órbita que se inicie en la zona caótica de puntos en (d) llenará densamente la zona, mostrando así una independencia de las condiciones iniciales el comportamiento del sistema. En la transición de (c) a (d), la aparición de pequeñas órbitas aumenta al acercarse a la energía de traslape, pero se vuelven cada vez más pequeñas hasta convertirse en puntos caóticos. Fijándonos en dos puntos muy cercanos en la figura 3.60(d) que estén fuera de la región caótica, sus órbitas se separarán al transcurrir el tiempo en forma lineal. La figura 3.70 muestra la separación de cuatro parejas de puntos en esta región.

Pero en la región caótica, dos puntos se separarán muchísimo más rápido. De hecho se alejan en forma exponencial. La figura 3.80 muestra un ejemplo de la separación de dos puntos en la zona caótica.

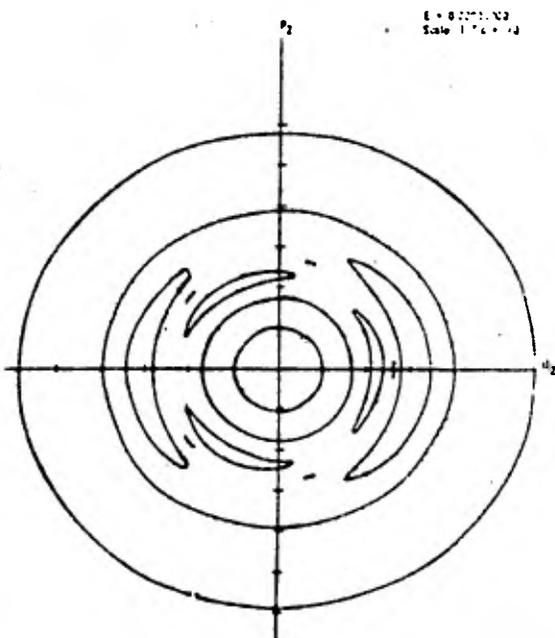
El comportamiento de la figura 3.80 significa que la entropía K en esta región es positiva, ya que dos órbitas contiguas se alejan exponencialmente. Por lo tanto, podemos decir que esta región tiene características de sistema C. Entonces podemos afirmar que la aparición de puntos es azarosa y que el sistema tiene en esta región un comportamiento estocástico. El comportamiento estocástico del sistema ocurre en el traslape de resonancias, entonces el parámetro de estocasticidad S debe tener un valor igual o mayor a uno (por eso dijimos que S es una medida útil para determinar cuando un oscilador perturbado tendrá un comportamiento azaroso). Este ejemplo muestra cómo un sistema mecá-



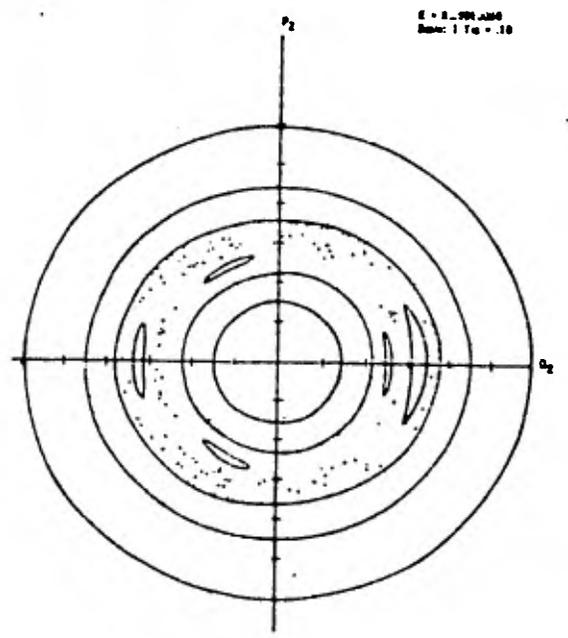
(a) $E = .056$



(b) $E = .18$



(c) $E = .20$



(d) $E = .2095$

Figura 3.60

nico con un hamiltoniano bien determinado, ecuación 3.500, posee propiedades estadísticas observables en sus planos de corte.

El segundo ejemplo nos mostrará más claramente la transición de un sistema mecánico a la estocasticidad. Este ejemplo fué calculado numéricamente por Hénon {10}. Partamos del hamiltoniano 3.120, cuyas ecuaciones de movimiento son:

$$\dot{q}_1 = -q_1 - 2q_1q_2$$

3.510

$$\dot{q}_2 = -q_2 - q_1^2 + q_2^2$$

Si graficamos las órbitas en el plano de corte definido por q_2 igual a 0 y p_2 mayor que 0, tendremos diferentes imágenes del comportamiento del sistema para energías mayores. La figura 3.90 muestra cómo varían las órbitas al cambiar la energía.

La figura 3.90(a) muestra órbitas cerradas bien comportadas. El sistema tiene frecuencias resonantes {2:1} y las podemos detectar en las pequeñas órbitas cerradas que aparecen, pero el sistema no es todavía inestable, ya que las resonancias no se han trasladado aún.

En la figura 3.90(b) han aparecido pequeñas órbitas alrededor de las originales y también trayectorias caóticas. Aquí ya tenemos traslapes de resonancias. Al aumentar la energía se obtiene la gráfica (c), donde sólo se tienen trayectorias caóticas o azarosas para cualquier punto inicial que se tome en la zona de estocasticidad, las cuales llenan densamente esa zona. A esta energía, el sistema 3.510 es azaroso en el plano de corte especificado en la figura 3.90(c).

La estructura de las órbitas cerradas en la figura 3.90(b) es muy interesante, ya que en cada una de ellas existen puntos fijos, alrededor de los cuales se forman órbitas abiertas y cerradas. En la figura 3.100 mostramos una de estas estructuras {15}. Primero tenemos los puntos fijos, en los que al cabo de Q iteraciones (o cruces) se llega al punto inicial; a estas órbitas se les conoce como curvas de Moser.

Alrededor de estos puntos fijos hay órbitas llenas densamente; sus formas pueden ser elípticas o abiertas (hiperbólicas), estas órbitas se conocen como curvas de Birkhoff. Cuando el punto fijo (Moser) tiene a su alrededor órbitas de Birkhoff elípticas, decimos que se trata de un punto fijo atractivo o estable y lo llamaremos punto elíptico. Si en cambio está rodeado de curvas de Birkhoff abiertas, el punto fijo será inestable o repulsivo y lo llamaremos punto hiperbólico.

En la figura 3.90(b), la densidad de puntos elípticos es mayor que la de hiperbólicos, sin embargo en (c) casi todos los puntos fijos son hiperbólicos. Esto muestra que para la energía en (c) la entropía K del sistema es positiva, ya que las curvas de Birkhoff alrededor de un punto hiperbólico se alejan exponencialmente. Esto nos conduce a la idea de que un comportamiento azaroso no debe poseer puntos fijos atractivos {5}, solamente repulsivos, como tenemos en (c).

Habiendo examinado estos dos ejemplos haremos un resumen de las características que posee un sistema mecánico con comportamiento azaroso:

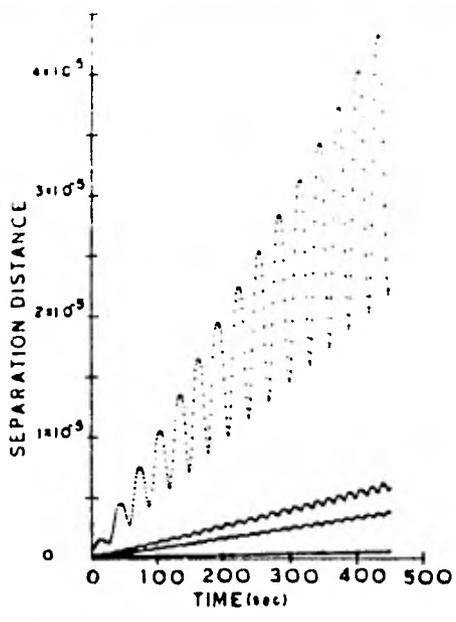


Figura 3.70

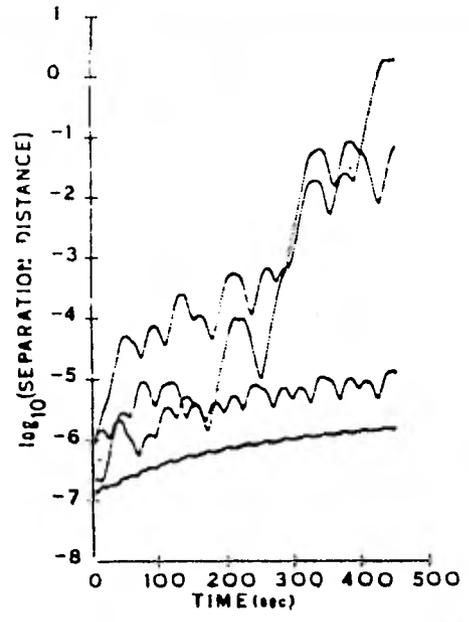


Figura 3.80

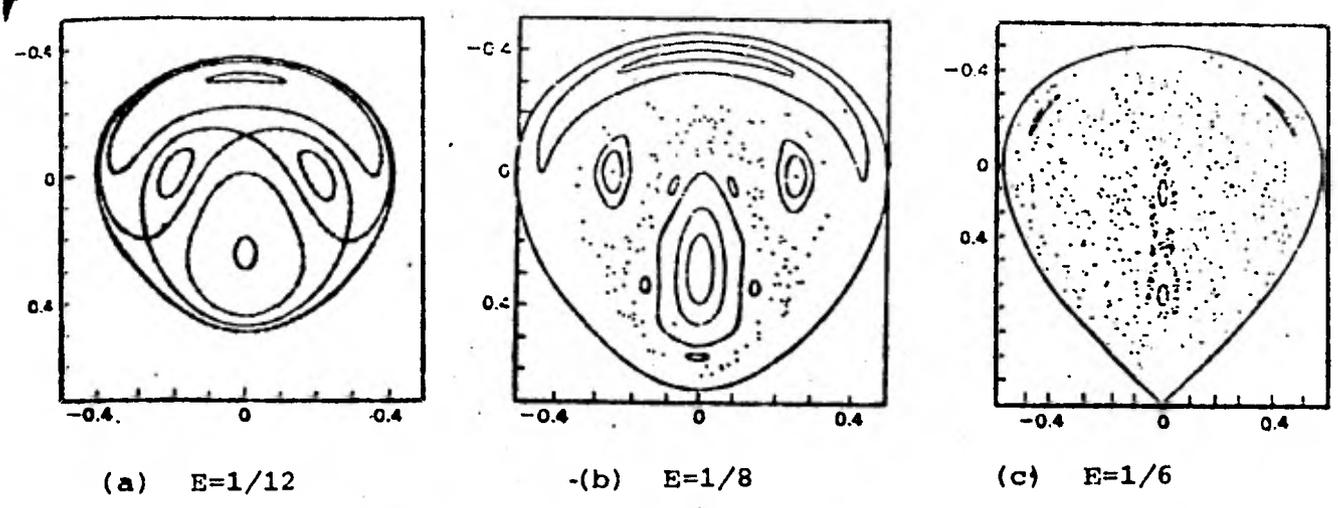


Figura 3.90



Curvas de Birkhoff

Curvas de Moser

Figura 3.100

- i) Debe ser un sistema con dos o más frecuencias resonantes; equivalentemente, tiene dos o más términos en el desarrollo 3.170 que conducen a denominadores pequeños.
- ii) Se deben violar las condiciones del teorema de KAM, al menos la condición de no resonancia.
- iii) Las resonancias se deben traslapar, de manera que el parámetro S en 3.490 sea mayor que uno.
- iv) Todos los puntos fijos deben ser hiperbólicos, implicando así que el sistema debe tener entropía K positiva.

Entonces el sistema reducido de sus integrales de movimiento aisladas, presentará en sus planos de corte un comportamiento azaroso.

Concluimos en esta sección que azar e inestabilidad "van de la mano": una implica la otra. Los sistemas azarosos e inestables son independientes de las condiciones iniciales y ambos tienen una entropía K positiva. Aquí podemos poner el ejemplo de una moneda que cae de canto sobre el suelo, la cara de la moneda que presentará al caer en el suelo resulta ser un proceso azaroso. Este fenómeno sucede debido a la alta inestabilidad del sistema el momento del choque de la moneda con el suelo, dos tiradas aparentemente iguales conducen a resultados azarosos, lo que corresponde a que dos puntos contiguos en G se alejarán exponencialmente en el tiempo.

e) Los Modelos Mecánicos y las Simulaciones

Los argumentos que presentamos en la sección anterior son justificados con cálculos numéricos hechos en simulaciones en computadoras. Se puede dudar sobre la relevancia del resultado, dado que una computadora trabaja con una aritmética finita, y podría pensarse que el redondeo de los resultados en las operaciones aritméticas ocasiona un resultado azaroso.

Para mostrar la independencia del método de cálculo del resultado del sistema que se simula numéricamente, utilizaremos el teorema de Anosov (2,22). A grandes rasgos nos asegura que un sistema C es estructuralmente estable. Esto significa que si perturbamos el sistema, el comportamiento global de éste no cambia (por ejemplo, el sistema perturbado seguirá siendo sistema C). Obviamente al perturbarlo, las órbitas de un sistema C cambiarán radicalmente, por ser altamente inestable, pero el conjunto de órbitas seguirá formando un sistema azaroso.

Debemos considerar que un redondeo en el cálculo de las simulaciones numéricas equivale a perturbar al sistema, entonces si el sistema resulta azaroso al calcularlo en una computadora, también lo será si el sistema se calcula exactamente, ya que será estructuralmente estable. El teorema de Anosov ha permitido usar la computadora como una herramienta matemática útil en el estudio de sistemas inestables.

También debemos recordar que la elección del plano de corte en el sistema es importante. Cada plano de corte presentará una estructura de órbitas diferente (cruces en el plano de corte) (15). Sin embargo, cuando el sistema se ha reducido en grados de libertad por sus integrales aisladas de movimiento, todos los planos de corte tendrán características de inestabilidad similares. En cada plano de corte se observarán los traslapes de resonancias en forma diferente.

En este capítulo hemos mostrado toda la herramienta básica para el estudio de sistemas con propiedades estadísticas y cómo usarla. Además hemos introducido el lenguaje y algunos teoremas de la teoría ergódica que son importantes en el estudio de sistemas con propiedades estocásticas. Con todo este material reunido, podremos en el siguiente capítulo estudiar el comportamiento de una cadena de osciladores no lineales y la distribución de energía que estas cadenas poseen.

4. Estudio de Cadenas de Osciladores

Como es bien sabido, para el estudio del micromundo es necesaria la Mecánica Cuántica. Esta surgió durante el estudio de la interacción en equilibrio de radiación y materia (radiación de cuerpo negro). Para una descripción adecuada de ese fenómeno fué necesario considerar a la energía de los osciladores como una variable cuantizada lo cual es ajeno a la mecánica clásica.

Al considerar al modelo del cristal unidimensional, formado por una cadena d osciladores, se puede estudiar en dos formas: La primera es considerar que la energía está cuantizada y otra solo considerar únicamente la mecánica clásica. Por los resultados obtenidos en la radiación de cuerpo negro, este sistema debe poseer una distribución de la energía en función de la frecuencia del tipo Planck. Si se considera el sistema puramente clásico, la mecánica estadística establece que solo puede poseer una distribución microcanónica o uniforme y por otro lado la teoría ergódica respalda este resultado si el sistema resulta ser ergódico.

Es claro entonces que un sistema de osciladores clásicos (sin cuantizar la energía) no puede poseer una distribución tipo Planck en la energía. Sin embargo, en los años de 1970 y 1972, Bocchieri et al. y Galgani et al. reportaron haber obtenido una distribución tipo Planck en la energía usando como modelo una cadena de osciladores anarmónica clásica con un potencial del tipo Lennard-Jones.

Tal resultado implicaba que era posible describir un fenómeno puramente cuántico a partir de la mecánica clásica, por otro lado contradecía los resultados de física clásica. En particular, la teoría ergódica demuestra formalmente que para un sistema ergódico, cualquier función de coordenadas $f(x, p)$ {2} se cumple:

$$\langle f \rangle = \bar{f} = \text{Cte.} = (1/\Omega) \int f d^N q d^N p$$

4.005

$$\Omega = \int d^N q d^N p$$

Lo cual nos muestra que cualquier tipo de distribución en el ensemble debe ser uniforme.

Por lo tanto era importante un estudio cuidadoso de los trabajos de Bocchieri et al. y Galgani et al., a fin de verificar sus resultados. De esa forma se podríamos decidir si ese sistema de osciladores viola los resultados clásicos y reproduce fenómenos cuánticos.

La aparición de la computadora y la capacidad de resolver ecuaciones diferenciales en forma numérica provocó que algunos físicos, entre ellos Fermi {24}, se lanzaran a la tarea de determinar las propiedades de cadenas de osciladores anarmónicos y verificar si la distribución de energía que poseen concuerda con lo predicho en la mecánica estadística. El primer intento (Fermi) resultó fallido, ya que el sistema era sensible a las condiciones iniciales. Sin embargo, trabajos posteriores muestra-

ron que sólo las cadenas que tenían ciertas propiedades (resonancias) podían ser insensibles a las condiciones iniciales y tener una distribución en la energía del tipo microcanónico.

Los trabajos de Bocchieri et al. {23} y Galgani et al. {26} sobre cadenas de osciladores con potencial Lennard-Jones (L-J) reportaron resultados sorprendentes: Cuando la energía es suficientemente alta (energía por partícula mayor que uno) se obtiene equipartición, en cambio a energías inferiores el sistema posee distribución tipo Planck. Este resultado es asombroso, ya que sin necesidad de cuantizar a los osciladores se obtiene una distribución tipo Planck (la cual aparece exclusivamente en sistemas cuánticos). De estos resultados se pueden inducir las siguientes ideas:

a) Se debe reconsiderar los fundamentos de la teoría cuántica ya que un sistema puramente mecánico reproduce un fenómeno que es considerado exclusivo de la mecánica cuántica.

b) Tal sistema no concuerda con la teoría ergódica y la mecánica estadística al tener una distribución diferente a la equipartición, por lo tanto se deben revisar los resultados de tales teorías y determinar porque no predicen tal comportamiento.

Por la importancia del modelo de cadena de osciladores con potencial L-J nos decidimos a estudiarlo más a fondo, tratando de reproducir los resultados de Bocchieri et al. y Galgani et al.: Nos interesaba probar numéricamente un conjunto más amplio de condiciones iniciales en tal sistema, ya que en estos trabajos utilizaron un conjunto un poco restringido de condiciones iniciales, y además examinar con mayor cuidado el método seguido para obtener los promedios.

Los resultados obtenidos mostraron indicios de que la cadena de osciladores con potencial L-J era sensible a las condiciones iniciales, implicando por lo tanto que dicho sistema no posee ningún tipo de distribución, ya sea microcanónica o tipo Planck.

En este capítulo nos referiremos al trabajo que realizamos con la cadena de osciladores tipo L-J. Primeramente mostraremos el modelo de cadena de osciladores anarmónicos en general, luego desarrollaremos un poco de teoría sobre el concepto de modos normales que es necesario para definir la distribución de energía en función de la frecuencia. A continuación mostramos un resumen de los trabajos que antecedieron a los de Bocchieri y Galgani para luego revisar con más detalle estos dos trabajos. Lo siguiente será mostrar el trabajo que desarrollamos en la siguiente forma:

Presentación del modelo mecánico, comentarios sobre las condiciones iniciales que se deseaban probar; explicación del método numérico utilizado y del método de tomar los promedios; por último se muestran los resultados y se comparan con los obtenidos por Bocchieri y Galgani.

a) El Modelo de la Cadena de Osciladores

En la teoría de estado sólido, un cristal se representa como un conjunto muy grande de átomos colocados en forma ordenada en todo el espacio (teniendo ciertas simetrías de acuerdo al cristal). Cada átomo vibra alrededor de su punto de equilibrio y se supone que un átomo sólo interactúa con sus vecinos más próximos (interacción de acoplamiento fuerte). Para estudiar propiedades genéricas de los cristales, se considera como modelo un cristal unidimensional, el cual es una cadena lineal de átomos. Cuando el cristal unidimensional está formado por un solo tipo de átomos, el modelo de cade-

na de osciladores resulta ser muy conveniente para representarlo. En tal caso, la cadena de osciladores estará formada por partículas idénticas y la fuerza entre partículas vecinas ha de determinarse para cada caso específico.

Supongamos inicialmente que el potencial entre partículas es idéntico al de un oscilador armónico; el modelo entonces lo representemos como una cadena de N masas equidistantes (en una dirección), unidos por resortes lineales, tal como se ve en la figura 4.10. La coordenada x_i representa la posición de la masa i relativa al origen. En reposo, todas las masas están separadas por una distancia a.

El hamiltoniano de la cadena lineal de osciladores es (considerando masas unitarias):

4.010
$$H = \sum_{i=1}^N (1/2)p_i^2 + \sum_{i=1}^N k(x_{i+1} - x_i)^2$$

Sus ecuaciones de movimiento forman un sistema de N ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas. Para desacoplar, utilizamos la transformación (8,13,23):

4.020
$$q_i = (2/N+1)^{1/2} \sum_{j=1}^N \sin(j\pi/(N+1)) x_j$$

$$p_i = (2/N+1)^{1/2} \sum_{j=1}^N \sin(j\pi/(N+1)) p_j$$

El hamiltoniano 4.010 se puede escribir como:

4.030
$$H = \sum_{i=1}^N (1/2)[p_i^2 + w^2 q_i^2]$$

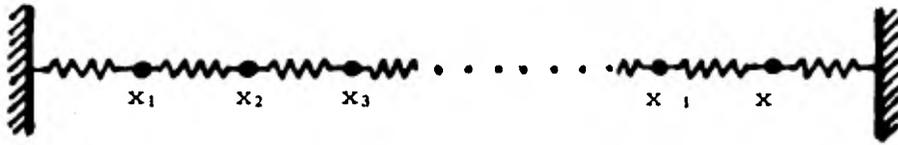


Figura 4.10

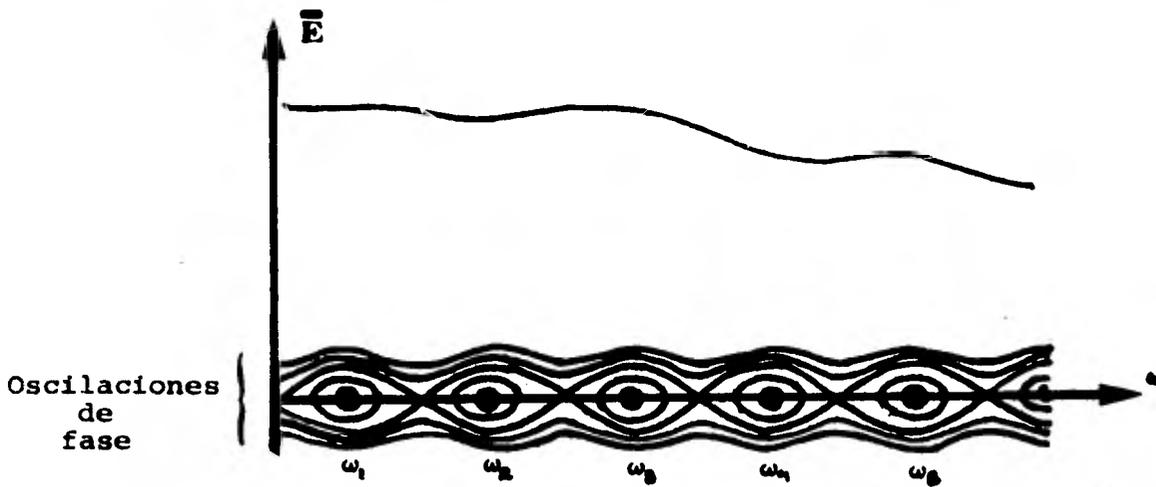


Figura 4.20

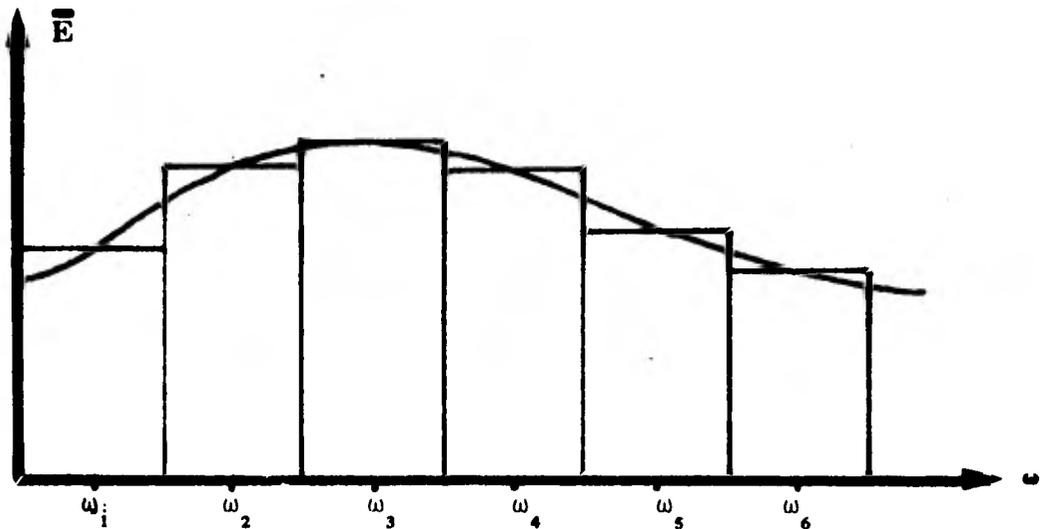


Figura 3.30

siendo w_i :

4.040
$$w_i = 4k \sin^2\left(\frac{i\pi}{2(N+1)}\right)$$

Con esto, las ecuaciones de movimiento del hamiltoniano 4.030 han sido desacopladas. Si reducimos este hamiltoniano a variables de ángulo y acción, llegamos a un hamiltoniano más reducido:

4.050
$$H = \sum_{i=1}^N w_i I_i$$

Se ve de inmediato que las acciones son constantes de movimiento. Cada producto de la sumatoria representa la energía de un oscilador armónico con frecuencia w_i . El hamiltoniano transformado 4.030 lo podemos interpretar entonces como un sistema equivalente de N osciladores armónicos independientes, cuyas frecuencias w_i son las con que se moverían las masas del sistema original si sólo es excitado el i -ésimo oscilador (transformado). Comúnmente se le llama a 4.020 la transformación a modos normales, donde cada modo representa a un oscilador armónico. Más adelante se discutirá detenidamente el significado de los modos normales.

La solución de las ecuaciones de movimiento del hamiltoniano 4.010 se puede obtener simplemente aplicando la transformación inversa de 4.020 a la solución de las ecuaciones de movimiento del hamiltoniano 4.030. Cuando el potencial del modelo se complica más, el hamiltoniano asociado tendrá términos cúbicos o de orden mayor:

4.070
$$H = \sum_{i=1}^N (1/2) p_i^2 + \sum_{i=1}^N k(x_{i+1} - x_i)^2 + \sum_{i=1}^N R(x_{i+1} - x_i)^3 + \dots$$

La transformación de modos normales no logra desacoplar en general las ecuaciones de movimiento del hamiltoniano 4.070, ya que la transformación 4.020 únicamente diagonaliza la matriz formada por los coeficientes de los términos cuadráticos $x_i x_j$, así, solamente elimina los términos cruzados de segundo orden:

$$4.080 \quad H = \sum_{i=1}^N (1/2)[p_i^2 + w_i^2 q_i^2] + \sum_{i,j=1}^N c_{ij} q_i q_j + \dots$$

Este hamiltoniano tiene la misma forma que el de 3.020. Del capítulo III sabemos que el sistema de ecuaciones del hamiltoniano 4.080 puede desacoplarse en N ecuaciones de osciladores no lineales forzado, igual al sistema 3.050, siempre y cuando el sistema cumpla las hipótesis del teorema de KAM. Esto nos asegura que las soluciones de las ecuaciones de movimiento estarán muy cerca de las del hamiltoniano 4.010. Las frecuencias asociadas a los modos normales se conservarán muy próximas a las frecuencias 4.040.

Cuando el sistema no cumple con el teorema de KAM, debemos esperar un comportamiento muy diferente al del sistema lineal; además, si existen traslapes de resonancia, podremos detectar comportamiento azaroso en los planos de corte.

b) Modos Normales

Cuando tenemos una cadena de osciladores armónicos con un hamiltoniano como 4.010, encontramos que la transformación 4.020 nos conduce a un hamiltoniano de N osciladores armónicos desacoplados con frecuencias w_i dadas por la ecuación 4.040. Como cada oscilador del hamiltoniano 4.030 es conservativo en la energía, por ser integral de movimiento, la energía que le asignemos inicialmente a cada modo de oscilación se mantendrá para todo tiempo; en otras palabras, la distribución de energía no varía en el tiempo.

Cada modo queda identificado por la frecuencia a la que oscila, w_i ; es por ello que la distribución de energía que demos a cada modo será una distribución de energía en función de la frecuencia w_i . Por lo tanto, para el sistema 4.010, la transformación a modos normales nos da N constantes de movimiento en la forma de N osciladores armónicos independientes, y además la distribución de energía inicial no cambia en el tiempo.

Sin embargo, para potenciales no lineales, con un hamiltoniano como el dado en 4.070, no existe en general ninguna transformación que desacople el sistema de ecuaciones en N osciladores no lineales independientes. Aplicando de cualquier forma la transformación 4.020, se obtiene un hamiltoniano sin términos cruzados de segundo orden, tal como el hamiltoniano 4.080. Propongamos que los términos de orden cúbico o mayor de este hamiltoniano contribuyan a la energía en menor proporción que la parte lineal (términos cuadráticos), de tal forma que podamos expresar el hamiltoniano como 3.040. Si además se cumplen las hipótesis del teorema de KAM, las soluciones de este sistema no se alejarán mucho de las obtenidas del hamiltoniano lineal 4.030. La energía de cada modo normal se conservará cercana a su valor inicial, con lo cual la distribución de energía no variará en el tiempo (en forma aproximada).

Cuando la cadena de osciladores anarmónicos no cumple las hipótesis del teorema de KAM, tendrá resonancias. Las frecuencias w_i ya no serán constantes y se tendrán oscilaciones de fase tal como lo de movimiento del hamiltoniano 4.080 las podemos escribir como:

$$\ddot{q}_1 = w_1 q_1 + (\partial/\partial q_1) f_1(q_1, t)$$

4.085

$$\ddot{q}_N = w_N q_N + (\partial/\partial q_N) f_N(q_N, t)$$

Las f_i son funciones periódicas del tiempo y de q_j , las cuales describen aproximadamente la contribución de las otras coordenadas q_j en esta ecuación. El hamiltoniano correspondiente a este sistema de ecuaciones sería:

4.080

$$H = \sum_{i=1}^N (1/2) [p_i^2 + w_i^2 q_i^2 + 2f_i(q_i, t)]$$

A cada elemento de la sumatoria lo llamaremos E_i ; representará la energía al tiempo t del oscilador anarmónico cuya ecuación de movimiento está en 4.085. Como consideramos que el sistema es resonante, E_i y w_i variarán en el tiempo, tal que $\sum E_i = \text{cte.}$

Para definir en este sistema la distribución de energía en función de la frecuencia sigamos el siguiente procedimiento:

Como las fases oscilan alrededor de la frecuencia w_i , al muestrear el sistema a intervalos muy cortos (menores que el periodo de oscilación del sistema) examinamos a que frecuencia oscila instantáneamente el hamiltoniano H_i (en 3.050) y la energía instantánea E_i de H_i . El promedio sobre un tiempo muy largo en comparación que el tiempo de muestreo nos indicará que la distribución de energía en función de la frecuencia es continua en intervalos (cada intervalo centrado en w_i). Cuando en el sistema se traslapan las resonancias, entonces ocurrirá que los intervalos también se traslaparán, obteniendo así una distribución continua, tal como vemos en la figura 4.20.

Para no hacer cálculos muy elaborados sobre las distribuciones continuas, podemos hacer el histograma de la distribución en forma gruesa, calculando en cada barra el promedio de energía que se encuentra entre $(w_i + w_{i+1})/2$ y $(w_i + w_{i-1})/2$ como tenemos en la figura 4.30.

La ventaja de esta idea es que la barra en w_i está representada esencialmente por el hamiltoniano H_i en promedio (en forma gruesa). Cuando el promedio en la distribución de energía se estabiliza, podemos decir que el sistema ha llegado a su estado de equilibrio macroscópico. El tiempo que tarda el sistema en alcanzar el estado de equilibrio se llama tiempo de relajamiento de sistema.

Como el modelo de cadena de osciladores es dependiente del potencial, se debe buscar el potencial adecuado tal que la distribución estadística que se obtenga concuerde con lo que predice la mecánica estadística o el experimento. En la siguiente sección revisaremos los estudios hechos sobre varios tipos de potenciales y que forma de distribución se obtiene en cada uno de ellos.

c) Estudios sobre Cadenas de Osciladores Anarmónicos

En esta sección resumiremos los resultados obtenidos en los trabajos que antecedieron a los trabajos de Bocchieri et al. {23} y Galgani et al. {26}. El punto en común de estos trabajos es el encontrar la distribución de energía en función de la frecuencia y verificar si concuerda con el resultado de la mecánica estadística. Antes de empezar, debemos tener en mente los siguientes puntos:

a) Las distribuciones de energía en el ensemble, en el sentido de la mecánica estadística, deben ser funciones que sólo dependan de variables de tipo macroscópico, como son la energía total, el número de partículas en el sistema, el volumen, etc. Esto significa que todas las condiciones iniciales (microestados) que tengan los mismos valores de las variables macroscópicas deben tener la misma distribución. Esto es lo que se conoce como insensibilidad a las condiciones iniciales.

b) Si en un sistema mecánico pedimos que la distribución sea insensible a las condiciones iniciales, no pedimos necesariamente que el sistema sea ergódico. En caso contrario, si el sistema es ergódico, cualquier función integrable (en L_1) e invariante (donde por invariante entendemos que el promedio temporal de f es independiente de la condición inicial) debe ser constante casi donde quiera {2}, en particular la

distribución de energía en un sistema estacionario es uniforme en el espacio fase (acotado en energía y posición) la cual corresponde a una distribución del tipo microcanónico en el ensemble.

Otro punto en común de estos trabajos consiste en verificar si es posible tener un sistema con equipartición de energía sin necesidad que el sistema sea ergódico.

Así pues, mostraremos a continuación los resúmenes de los trabajos de Fermi, Ford, Chirikov y Northcote:

1) FPU (Fermi-Pasta-Ulam){24}

A principio de los años cincuenta, Fermi, Pasta y Ulam iniciaron el estudio de cadenas de osciladores no lineales. Pretendían determinar si a partir de una pequeña perturbación en el potencial armónico se podía obtener una distribución microcanónica tal como predecía la mecánica estadística. Además deseaban determinar que propiedades ergódicas poseía el sistema.

Los potenciales que propusieron fueron los siguientes:

4.100

$$V_1 = (1/2)x^2 + (\alpha/2)x^3$$

4.110

$$V_2 = (1/2)x^2 + (\beta/4)x^4$$

$$V_3 = \delta(x^2/2) - \alpha x$$

$$\delta = \{ 1 \text{ si } -2^{-5} < x < 2^{-5}, 0 \text{ si } x \leq -2^{-5} \text{ y } x \geq 2^{-5} \}$$

4.120

con α y β como: $\alpha = 1/4, 1$ y $\beta = 1/16, 8$.

Con esos potenciales, el sistema fue simulado numéricamente en la computadora para un número de 64 partículas. Las condiciones iniciales excitaban al sistema en tres formas distintas: distribuyendo a las partículas en forma senoidal en la posición; en forma de diente de sierra y excitando el quinto modo normal. La energía se tomó tal que la energía asociada a la parte anarmónica del hamiltoniano no excediera el 10% de la parte armónica.

Los resultados que obtuvieron fueron desconcertantes para esa época, ya que no se conocía el teorema de KAM. Los modos normales compartían ligeramente energía pero para tiempos regresaban a la distribución de energía original; únicamente compartían energía los modos de frecuencia alta. No se notó ninguna tendencia a la equipartición.

Por otro lado, el sistema no mostró ninguna propiedad de ergodicidad o mezcla, comportándose más bien como un sistema estable. Este trabajo condujo a muchas polémicas y varios autores trataron de encontrar la causa por la cual no se obtuvo equipartición.

II) Chirikov (1965) {12}

El objetivo principal del trabajo fue buacar la causa por la cual FPU no llegaron a la equipartición en la energía. Partió del potencial 4.100 y consideró un desacoplamiento de las ecuaciones de movimiento igual al sistema 3.050. Llevando a cada ecuación de ese sistema a su correspondiente ecuación de fase, como la ecuación 3.280, determinó las condiciones para las cuales el sistema se comportaría estocásticamente, tal que S en 3.490 fuera mayor que uno. Concluye que al excitar inicialmente los modos altos de frecuencia resulta un comportamiento estocástico, en cambio una excitación de los modos bajos nos lleva a comportamientos cuasiperiódicos. Muestra resultados numéricos que concuerdan con su hipótesis. Además concluye que el modelo FPU no mostró estocasticidad puesto que sólo excitó modos de frecuencia baja.

III) Ford (1963) {21}

Al igual que Chirikov, el propósito de su trabajo fue encontrar la razón por la cual FPU no llegaron a la equipartición de la energía.

Partió del potencial 4.100 suponiendo que la energía de la parte no lineal no excediera de un 10% de la energía en la parte lineal. El método que siguió se basa en el uso de un método perturbativo en el sistema de ecuaciones transformado por 4.020. A partir de ahí analiza las condiciones en que aparecen denominadores pequeños en la solución de las ecuaciones de movimiento. Estos denominadores pequeños dan origen a la inestabilidad del sistema. El escoger en forma apropiada las frecuencias w_j en el sistema nos puede conducir a tener denominadores pequeños.

Demuestre, numéricamente, que las frecuencias asociadas a denominadores pequeños (calculadas teóricamente) conducen a equipartición de la energía, haciéndolo para 2, 3, 5 y 15 partículas. Muestra también que el modelo de FPU no posee frecuencias de "resonancia" y que por lo tanto debe ser un sistema cuasiperiódico.

Con respecto a la ergodicidad del sistema, muestre que la cadena de osciladores con frecuencias resonantes posee más de una constante de movimiento; para el caso de $N=2$, lo muestra analíticamente. Para mayor número de partículas lo muestra numéricamente.

Propone que la forma de considerar modos normales en cadenas de osciladores no lineales consiste en asociar estos a las constantes de movimiento que posee el sistema. También muestra numéricamente que la distribución de energía en el tiempo de un oscilador en el sistema con frecuencia resonante sigue una distribución tipo Maxwell-Boltzmann y que para una cadena de osciladores lineales, la distribución de la partícula de en medio es del tipo Maxwell-Boltzmann. Con eso concluye que las partículas extremas resultan ser un buen baño térmico.

Cabe notar que para $N=2$, la cadena con frecuencia de resonancia es idéntica al sistema de Hénon {26} en 3.510.

IV) Northcote (1963) {25}

Su trabajo se concreta a estudiar una cadena de osciladores lineales, donde las partículas pueden chocar entre ellas si se acercan lo suficiente. Muestra que tal sistema llega a equipartición si la energía es superior a cierto umbral. El potencial consistió en un término cuadrado más una pared de

potencial, la cual simulaba el choque elástico entre partículas (las cuales poseían cierto radio). La conclusión de este trabajo fue que cuando la energía es suficiente como para que las partículas choquen, el sistema llega a la equipartición de la energía, lo cual se muestra numéricamente.

d) Bocchieri et al. (1970) y Galgani et al. (1972)

Quince años después del trabajo de Fermi, Bocchieri et al. (23) volvieron a retomar el problema de la cadena de osciladores, esta vez asignándole un potencial del tipo Lennard-Jones (L-J), que es usado normalmente en potenciales interatómicos (utilizando valores de constantes atómicas) y renormalizando el potencial obtienen:

4.130
$$V = 110(x^{-12} - x^{-6}) + 27.5$$

La intención de este trabajo fue verificar si se cumplía la equipartición de la energía en los modos normales cuando se proponía un potencial similar al que existen en las moléculas. Para hacerlo, recurrieron a los métodos numéricos para simular la cadena de osciladores con potencial L-J. Sus ecuaciones de movimiento eran:

4.135
$$\ddot{y}_i = -660(1 - 2(2^{1/6} + x_i - x_{i+1})^{-6})(2^{1/6} + x_i - x_{i+1})^{-7} \\ + 660(1 - 2(2^{1/6} + x_{i+1} - x_i)^{-6})(2^{1/6} + x_{i+1} - x_i)^{-7}$$

Las condiciones iniciales que reportaron en ese trabajo fueron:

- i) La gama del número de partículas que probaron fue de 2 a 100
- ii) La gama de las energías probadas variaron de $E/N=1/20$ a $E/N=10$, donde E/N significa la energía por partícula.
- iii) La energía se distribuye principalmente en el primer modo normal (el de frecuencia más baja). En algunos otros casos se equidistribuyó la energía.

El tiempo de simulación varió entre 77 y 1154 períodos largos (período del modo de frecuencia más baja), el cual dependía del número de partículas que deseaban simular.

El método para promediar fué calcular la energía del hamiltoniano de cada modo no perturbado:

4.136

$$E_k = (1/2)(p_k^2 + w_k^2 q_k^2)$$

Promediaron en el tiempo cada E_k , utilizando la transformación 4.020 para calcular p_k y q_k .

Los resultados obtenidos los podemos resumir en la siguiente forma:

- I) Cuando $N > 8$ y $E/N > 1$, la distribución de energía en función de la frecuencia (E) tiende a equipartición.
- II) Cuando $N > 8$ y $E/N < 1$ y se excita un solo modo normal inicialmente, el sistema tiene un comportamiento recurrente (cuasiperiódico).
- III) Cuando $E/N < 1/10$, no importa como se excite el sistema inicialmente, siempre tendrá un comportamiento recurrente.
- IV) Para $N=2$ y $N=4$, el sistema tiene un comportamiento recurrente si es excitado un solo modo normal.

Con estos resultados, se puede concluir que $E/N=1$ es el umbral de energía para obtener equipartición (siempre que N sea mayor que 8).

El trabajo de Galgani {26} de 1972 toma la misma cadena de osciladores utilizada por Bocchieri y se interesa por encontrar el tipo de distribución que tiene el sistema debajo del umbral $E/N=1$. El método numérico y el modo de promediar E_k son idénticos al del trabajo anterior. Las condiciones iniciales que considera son:

- I) N va de 10 a 100.
- II) E/N está entre 0.01 y 1.
- III) Se excita únicamente el primer modo normal.

Bajo estas tres condiciones iniciales, Galgani afirma que la distribución de energía E_j (donde el índice j representa el j -ésimo intervalo de tiempo donde se promedia E y n es el número del modo normal) tiene la forma de una distribución de Planck:

4.150

$$\langle E_j \rangle = (\alpha w_{jn}) / (e^{\alpha w_{jn}} - 1)$$

El parámetro α se calcula dimensionalmente como:

4.155

$$\alpha(m, s, \sigma) = (ms)^{1/2} \sigma \alpha(1, 1, 1)$$

Siendo m la masa, ϵ la constante de acoplamiento y σ la distancia entre los átomos. Encuentran que $a(1,27.5,1)$ es igual a 0.1, así que:

4.156
$$a = 0.02m^{1/2}\epsilon^{1/2}\sigma$$

En física atómica y molecular, los parámetros m , ϵ y σ cumplen con cierta precisión la siguiente relación:

4.157
$$\sqrt{m\epsilon} a = 2Zh$$

Z es el número de electrones en el átomo, así que a se reescribe como:

4.160
$$a = Z/(25h)$$

El parámetro β en la ecuación 4.150 se ajusta por el método de Chi-cuadrada:

4.170
$$\chi^2(\alpha) = (1/N) \sum_{i=1}^N [(\beta_i(\alpha) - \bar{\beta}(\alpha))^2 / \beta_i(\alpha)]$$

$$\bar{\beta}(\alpha) = (1/N) \sum_{i=1}^N \beta_i(\alpha)$$

Además demuestra que se tiene un mejor ajuste con la distribución de 4.150 que en una de tipo exponencial. Muestran un ejemplo para $N=14$, obteniendo un valor para β de 1/2 (aproximadamente).

A continuación examinaremos las conclusiones de Galgani y Bocchieri.

El trabajo de Galgani prueba condiciones iniciales en las cuales, según Bocchieri, no existe tendencia a la equipartición de la energía. Sin embargo, a tales energías y excitando un solo modo normal, Bocchieri afirma que el sistema puede tener un comportamiento recurrente. Una duda que surge del trabajo de Galgani es como se puede hablar de una distribución tipo Planck en tales condiciones iniciales cuando el trabajo anterior asegura que el sistema se comporta recurrentemente (o sea, sensible a las condiciones iniciales).

Otro punto que llama la atención es el hecho de que casi todas las condiciones iniciales corresponden a la excitación únicamente del primer modo normal, y en otras pocas veces equidistribuyendo la energía. Pero, ¿qué sucede cuando se excita con otra condición inicial, en particular si se excita el último modo normal? Si en estos trabajos afirman que existe algún tipo de distribución, ya sea Planck

o microcanónica, debe ser independiente casi siempre de las condiciones iniciales (siempre y cuando las variables macroscópicas sean las mismas). En el trabajo de Galgani se hace la aclaración que cuando se excitan modos normales aitos no se llega a una distribución tipo Planck y no dan ninguna justificación acerca de este hecho.

Si la cadena de osciladores con potencial L-J posee dos diferentes tipos de distribuciones, implicaría que $E/N=1$ significa un cambio de fase en el sentido termodinámico, ya que el sistema cambia sus propiedades macroscópicas, pero surge la pregunta si dicho sistema solo posee estos dos tipos de distribución o si existen otro más?

Era necesario aclarar este conjunto de confusiones y dudas que teníamos sobre los trabajos de Bocchieri y Galgani (en particular el segundo trabajo resultaba muy oscuro en sus conclusiones). Para poder asegurar la existencia de una distribución tipo Planck en la cadena de osciladores con potencial L-J era necesario simular numéricamente dicho sistema y probar aquellas condiciones iniciales que fueron discutidas en los trabajos de Bocchieri y Galgani para así verificar si tales distribuciones son insensibles a las condiciones iniciales. El no realizar tales simulaciones numéricas implicaría que cualquier crítica sobre esos trabajos resultaría ambigua.

e) Descripción del Modelo y Discusión del Método Numérico

Para estudiar el movimiento y calcular la distribución de energía de una cadena de osciladores con potencial L-J debemos primero establecer el modelo. El potencial L-J que existe entre partículas contiguas lo tenemos descrito en la ecuación 4.130, donde x es la distancia entre las partículas. La forma de este potencial la podemos observar en la figura 4.40. El punto de mínima energía se encuentra en $2^{1/6}$. Las ecuaciones de movimiento de la cadena de osciladores con potencial L-J para N partículas son las ecuaciones 4.135, que son N ecuaciones diferenciales de segundo orden. Por medio de las ecuaciones de Hamilton, podemos cambiar el sistema de N ecuaciones 4.135 por un sistema de $2N$ ecuaciones de primer grado:

$$\begin{aligned}
 \dot{p}_i = & -660(1-2(2^{1/6}+x_i-x_{i+1})^{-6})(2^{1/6}+x_i-x_{i+1})^{-7} \\
 & +660(1-2(2^{1/6}+x_{i+1}-x_i)^{-6})(2^{1/6}+x_{i+1}-x_i)^{-7} \\
 \dot{x}_i = & p_i
 \end{aligned}$$

4.190

El valor de i va de 1 a N , además $x_0 = x_{N+1} = 0$ por ser una cadena de extremos fijos.

Para simular el comportamiento de la cadena de osciladores a través de tiempo, se buscó la solución del sistema de $2N$ ecuaciones 4.190 en forma numérica. El método utilizado fue el de Adams y Moulton (27) con la característica de tener un arranque automático de primer orden, control de orden (hasta octavo orden) y paso variable según los requerimientos de precisión deseados.

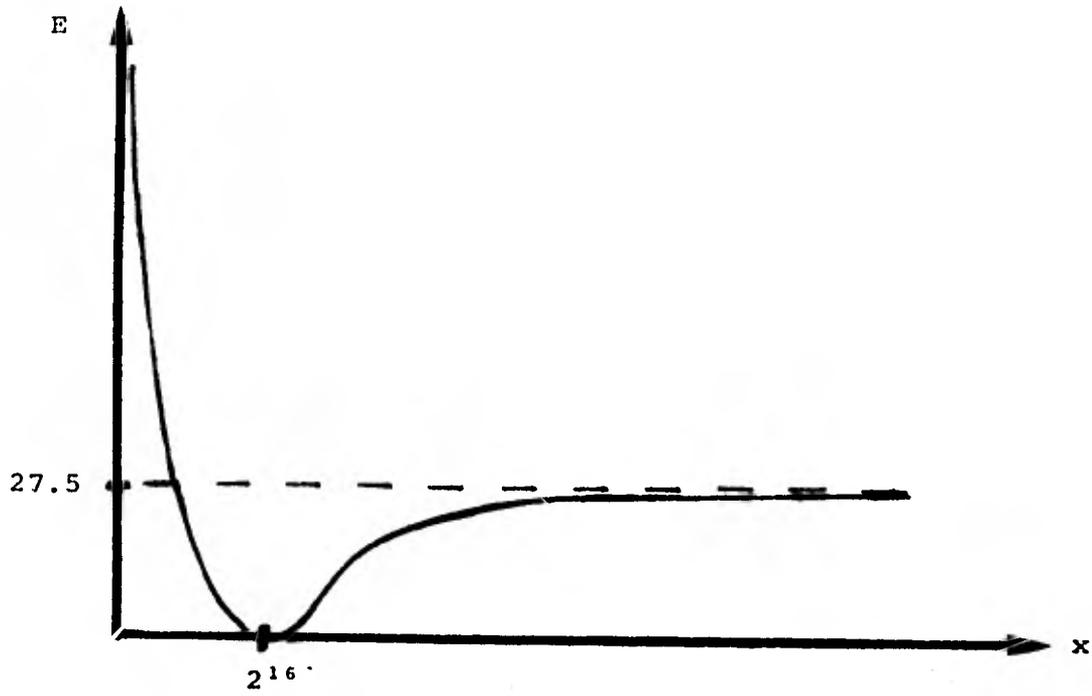


Figura 4.40

El programa de simulación, en la mayoría de los casos, calcula 100 000 puntos a partir de la condición inicial (un punto es un vector de $2N$ coordenadas p_i y x_i), de los cuales sólo se guardan en disco 10 000 puntos (uno cada diez calculados) para hacer posteriormente promedios sobre ellos.

El programa se corrió en una computadora PDP-11/34 con procesador de punto flotante; el programa se dividió en tres partes, uno que inicia la simulación, otro que propiamente realiza la integración de las ecuaciones y el último que realiza los promedios.

La unidad de tiempo de simulación es el período largo (tal como lo define Bocchieri), que es el período de la frecuencia más baja. Las frecuencias no perturbadas están dadas como:

$$w_i = 2\sqrt{660} \sin(\pi/2(N+1))$$

4.200

Así, el período largo es aproximadamente $N/20$.

Los tiempos de simulación fueron en promedio de 50 a 100 períodos largos, que llevan aproximadamente dos horas de máquina. La precisión en la energía no varió más del 1% en la mayoría de las simulaciones. En total se realizaron 16 simulaciones numéricas, de las cuales una se extendió a casi 1000 períodos largos (ocupando más de 40 horas de procesador).

f) Datos Iniciales y Forma de Calcular los Promedios

Después de verificar que el sistema de cómputo funcionara bien probándolo con un sistema de diez osciladores armónicos, se tenía que decidir las condiciones iniciales que nos eran de mayor interés.

En primer lugar, el número de partículas que tomamos fue $N=10$ pero también se probó $N=11$, el elegir este número dependió de la capacidad de cómputo con que contábamos, tratando de escoger el menor valor de N posible tal que estuviera arriba del límite marcado por Bocchieri de $N=8$.

La gama de energías con las que trabajó fue relativamente amplio, de $E/N=1/8$ a $E/N=8.14$, para así poder cubrir el espectro de energía en el cual Galgani reporta haber tenido distribución tipo Planck ($E/N=0.01$ a 1) y también el intervalo de energía donde Bocchieri nos muestra que obtuvo equipartición (E/N mayor que 1).

La forma en que se excitó inicialmente al sistema la podemos dividir en dos partes: i) Excitando un solo modo normal, ii) Excitando una sola partícula. En ambos casos se le dio toda la energía inicial a la partícula o modo en forma de energía cinética. Como se puede ver de la transformación 4.020, cuando se excita una sola partícula equivale a excitar a todos los modos normales siguiendo una distribución proporcional a:

$$\sin^2(\pi i/N+1)$$

4.205

Igualmente, al excitar un solo modo, las partículas se excitan proporcionalmente a 4.205.

Como nuestra intención era examinar el comportamiento de la cadena L-J en condiciones iniciales

diferentes a las utilizadas por Bocchieri y Galgani, decidimos hacer una serie de simulaciones excitando el último modo normal a diferentes energías. También excitamos el primer modo normal para tener una forma de comparar las distribuciones obtenidas de ambas formas de excitar el sistema. Cuando se excitó una sola partícula, los modos se excitaron en forma proporcional a 4.205; este tipo de excitación inicial del sistema nos dió la posibilidad de verificar cuáles modos normales compartían energía más fuertemente. En total se realizaron 16 simulaciones, de las cuales 8 correspondieron a excitar el último modo normal ($E/N=1/8, 3/4, 1, 5, 8.14$ y $50/11$), otras dos excitando el primer modo normal ($E/N= 1, 5$), seis excitando a la primera partícula ($E/N=1/8, 1/4, 1/2, 1, 2, 5$) y por último dos excitando los modos en forma azarosa ($E/N=8.14$).

El método seguido para promediar consistió en tomar 20 subpromedios de los datos que estaban almacenados en disco, de los cuales se obtiene un promedio total con su desviación. Dos tipos de variables se promediaron: la energía cinética de cada partícula y la energía cinética de cada modo normal, utilizando para este último promedio la transformación inversa de 4.020. El hecho de haber escogido como promedio la energía cinética y no la energía total fue porque conocemos con toda precisión el valor de la energía cinética (de los modos y las partículas) y en cambio utilizar la ecuación 4.136 para obtener la energía total nos da sólo un valor aproximado siempre y cuando las soluciones del sistema de ecuaciones no se alejen demasiado de la solución del sistema no perturbado, ya que sólo de esta manera podemos seguir identificando los modos normales. Por esta razón preferimos promediar la energía cinética, ya que si el sistema hubiera tenido comportamiento ergódico, el cálculo de energía total por medio de la ecuación 4.136 no tendría significado alguno.

En el apéndice se muestran los programas utilizados para simular el sistema y obtener sus promedios.

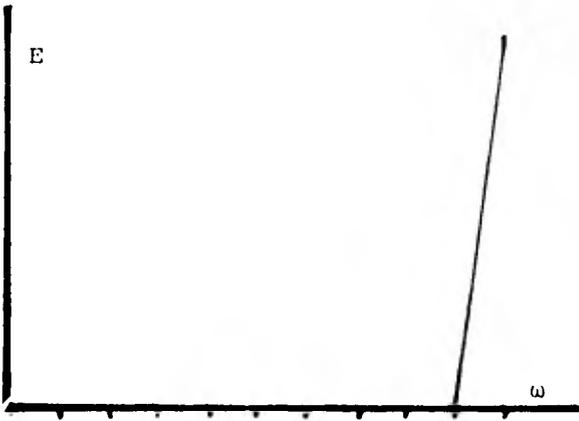
g) Resultados Obtenidos

Para analizar los resultados y compararlos con los obtenidos por Bocchieri y Galgani, agrupamos los resultados de acuerdo a la condiciones iniciales.

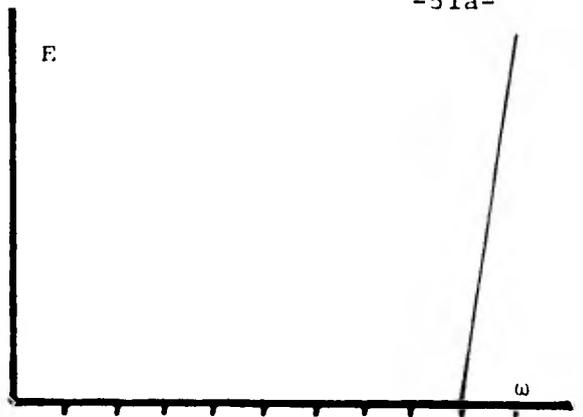
1) Último modo excitado

Los resultados en estas seis simulaciones fueron sorprendentes. Con esta condición inicial empezamos las simulaciones con una energía relativamente baja, $E/N=1/8$; al cabo de 80 períodos largos la distribución de energía se mantuvo invariante, o sea, el último modo normal no compartió su energía a los modos vecinos. Aumentamos la energía E/N a $3/4, 1, 5, 8.14$ y $50/11$, el resultado fue el mismo, la distribución no se modificó. En la figura 4.50 podemos ver los resultados, los cuales nos indica que de alguna forma el último modo mantiene su energía invariante, aún cuando $E/N > 1$ (con $N=10, 11$), lo que no concuerda con el resultado de Bocchieri, ya que deberíamos esperar equipartición de la energía. Ahora, para energías bajas ($E/N = 1/8$) se debía haber obtenido una distribución tipo Planck según Galgani, pero el resultado que obtuvimos no es de ninguna manera una distribución tipo Planck.

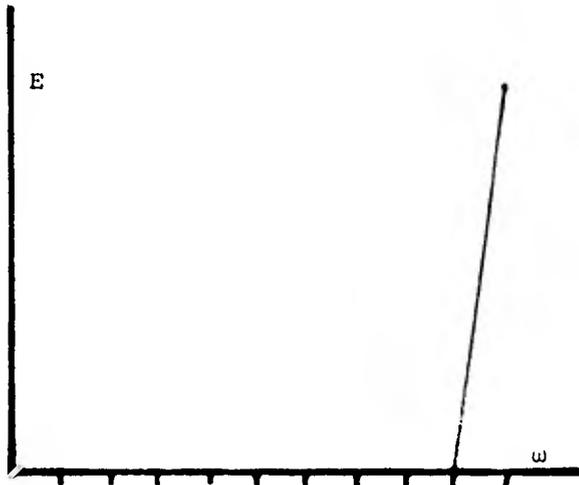
Es plausible pensar que el sistema, bajo esta condición inicial, tiene un comportamiento recurrente, ya que el último modo mantiene su energía tal como resultaría en el sistema no perturbado. Es cierto que los tiempos de simulación corresponden a la décima parte del tiempo utilizado en el trabajo de Bocchieri, sin embargo no se nota ninguna tendencia del último modo a compartir energía con sus vecinos.



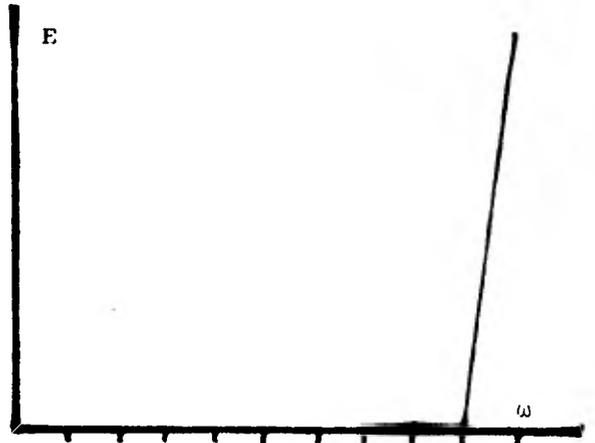
$E/N=1/8$ $T=80$



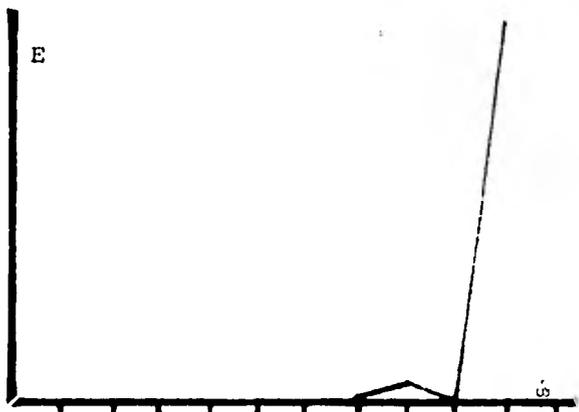
$E/N=3/4$ $T=80$



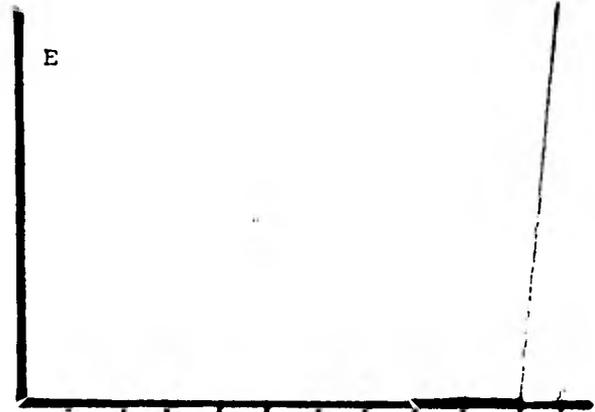
$E/N=1$ $T=80$



$E/N=5$ $T=70$



$E/N=8.14$ $T=65$



$E/N=50/11$ $T=65$

Figura 4.50

Tal resultado nos hace sospechar que el sistema es fuertemente sensible a las condiciones iniciales, inclusive para $E/N > 1$.

2) Primer modo excitado

Con esta condición inicial sólo realizamos dos simulaciones con las siguientes energías, $E/N = 1$, $50/11$. El resultado obtenido indica que el primer modo normal comparte energía a los modos vecinos rápidamente, tal como lo vemos en la figura 4.55.

Bajo esta condición inicial podemos esperar que en un tiempo mayor, por ejemplo 1000 períodos largos, se llegue a obtener equipartición. Tal parece que este resultado concuerda con el obtenido por Bocchieri.

Un hecho interesante es que la rapidez con la que el primer modo comparte energía con sus vecinos depende de la energía total del sistema, pues a bajas energías (menores que $E/N = 1$), la distribución de energía del sistema cuando se excita inicialmente el primer modo tendrá aproximadamente la forma de la figura 4.55 después de un período muy largo de simulación. Tal forma nos recuerda una distribución tipo exponencial o tipo Planck (que es el tipo de distribución que Galgani obtiene). Pero esto implica que sólo excitando los primeros modos normales se obtiene una distribución tipo Planck, lo que significa que tal distribución depende fuertemente de las condiciones iniciales. En el trabajo de Galgani se encuentra un comentario referente a que sólo excitado el primer modo normal se podía obtener la distribución tipo Planck, lo cual apoya nuestra hipótesis. Podemos concluir que la distribución tipo Planck es sensible a las condiciones iniciales.

3) Primera partícula excitada

Por los resultados obtenidos en 1) y 2) es de esperar que cuando el sistema se excite inicialmente con una distribución proporcional a 4.205, sólo en los modos bajos se podrán apreciar cambios en la distribución, en cambio los modos altos mantendrán su energía inicial con la que fueron excitados. En las simulaciones realizadas con esta condición inicial y con energías iguales a $E/N = 1/8$, $1/4$, $1/2$, 1 , 2 y 5 , se obtuvieron las distribuciones de energía de los modos normales tal como se puede ver en la figura 4.60.

Este resultado nos confirma que los modos bajos comparten energía más fuertemente que los modos altos y la velocidad con que lo hacen depende de la energía total del sistema. De esta afirmación se sugiere que la equipartición del sistema depende fuertemente de que sean excitados inicialmente algunos modos bajos.

4) Distribución de energía en las partículas

Al observar las distribuciones de energía en las partículas nos damos cuenta de que cuando son excitados algunos modos bajos inicialmente, la distribución de energía de las partículas tiene la forma que se muestra en la figura 4.70.

Son las partículas de los extremos las que generalmente tienen una energía en unos casos mayor y en otros menor que el promedio de las partículas interiores. Tal comportamiento sugiere que las

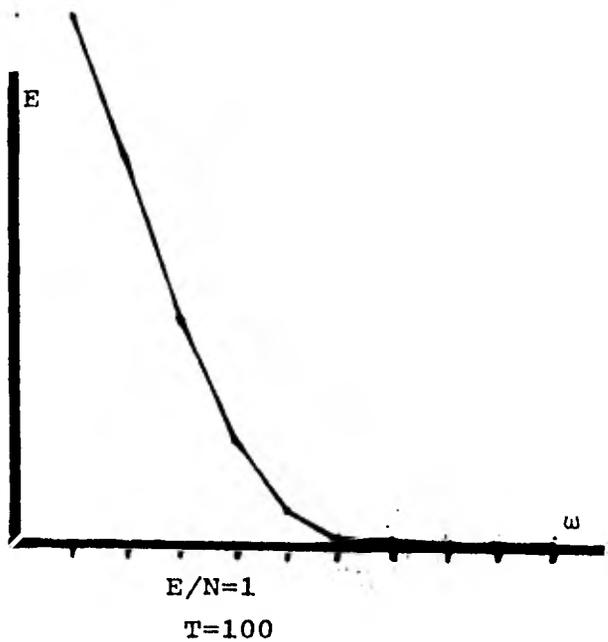
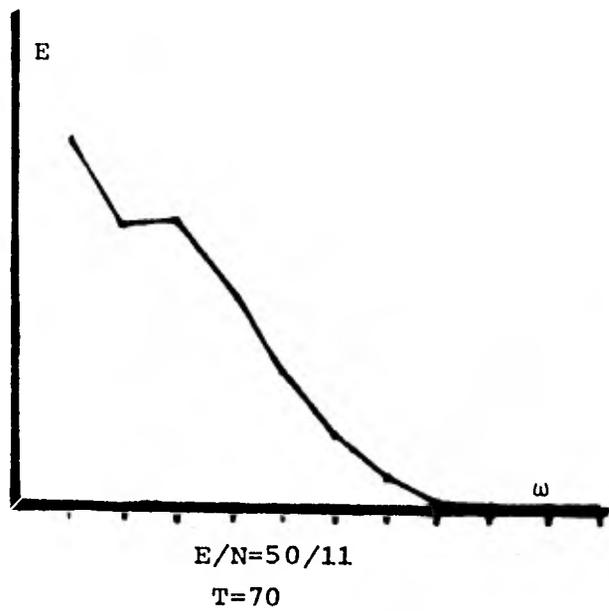


Figura 4.55

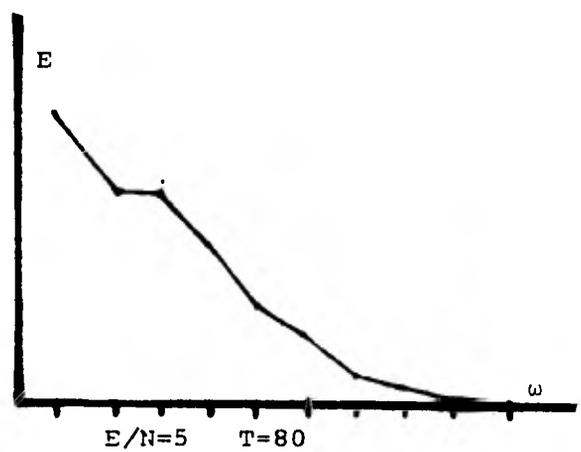
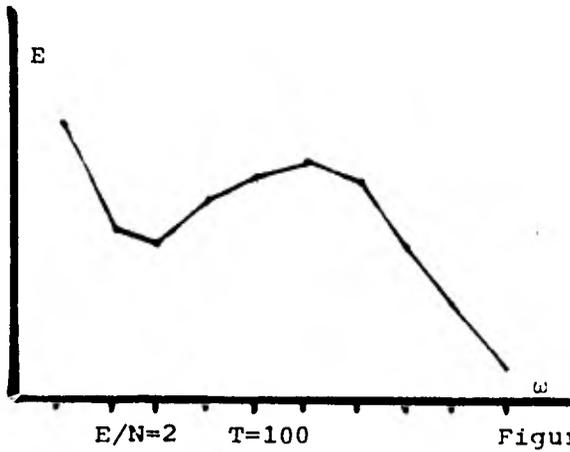
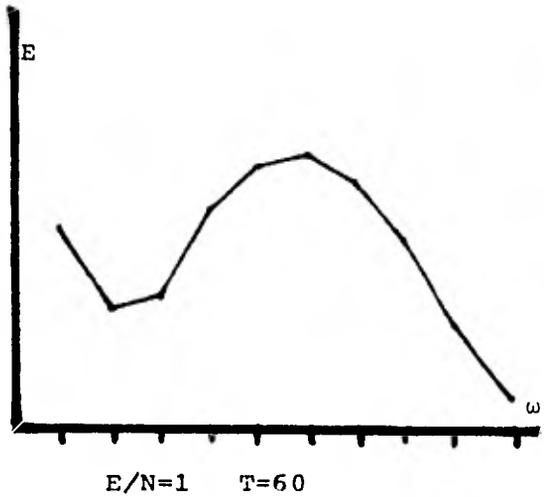
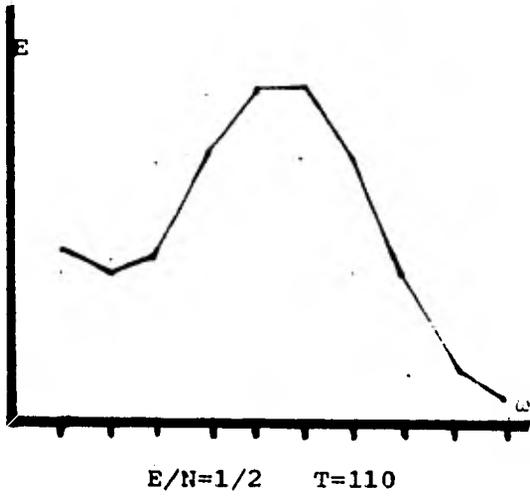
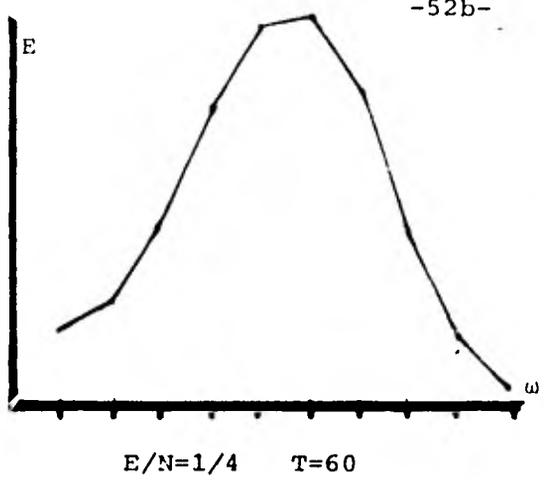
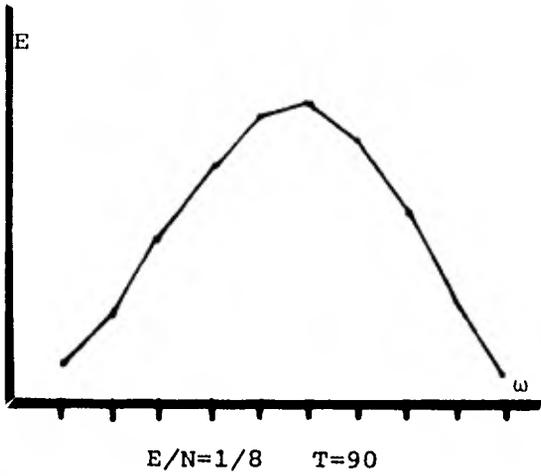


Figura 4.60

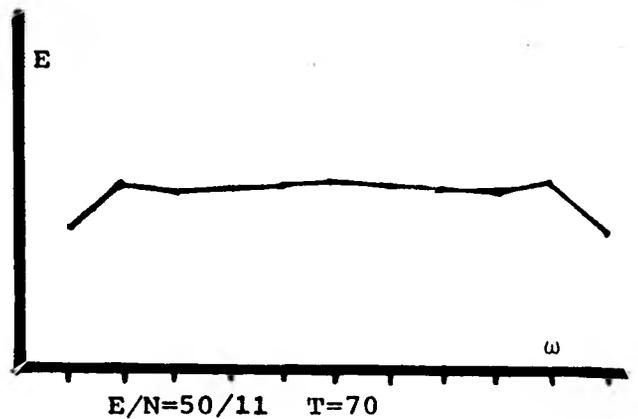
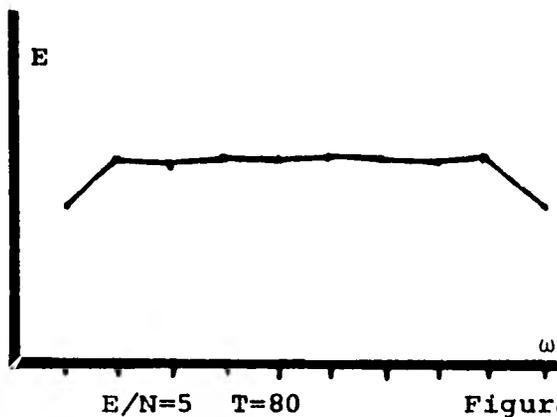
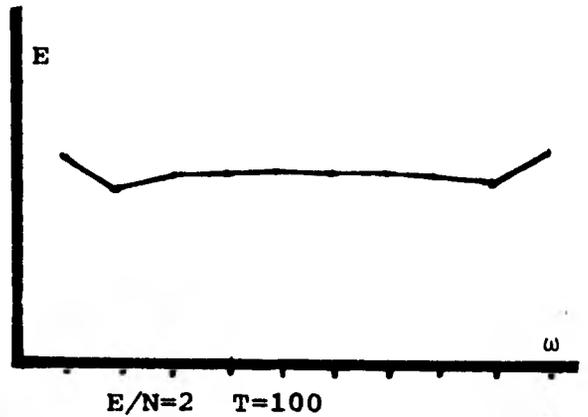
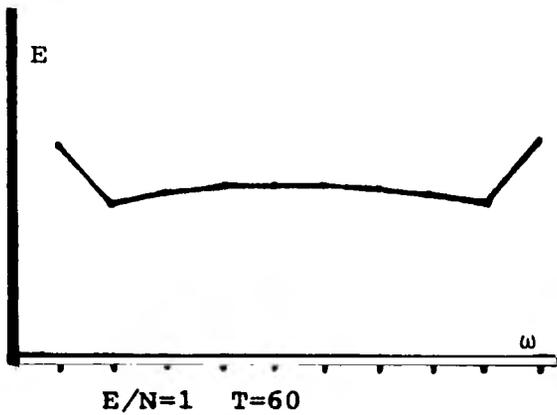
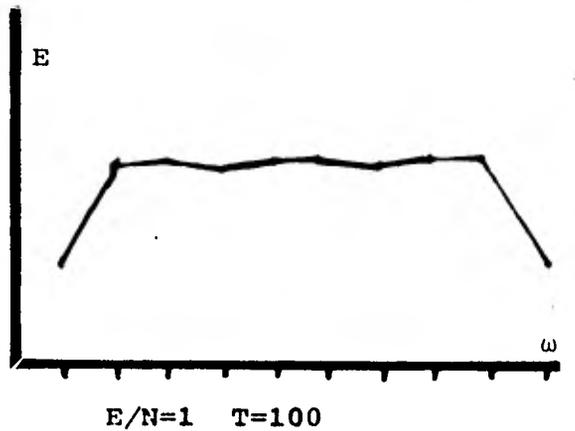
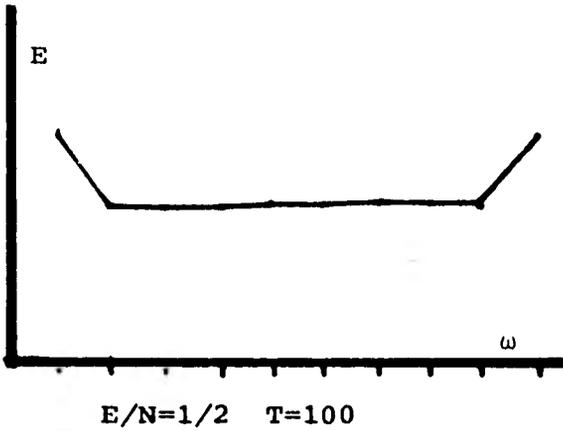
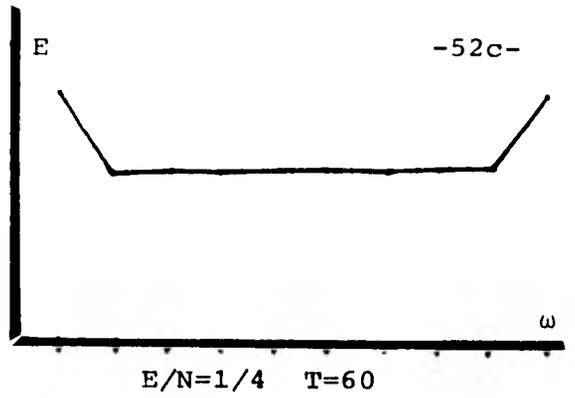
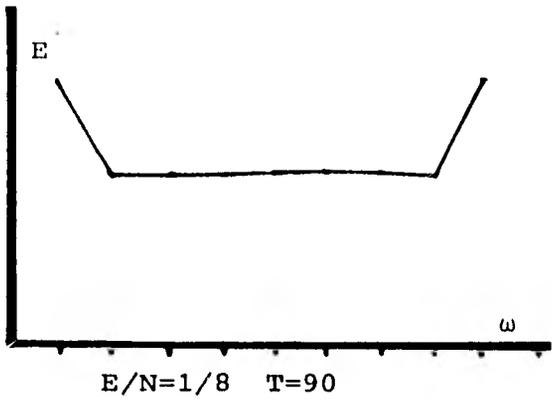


Figura 4.70

partículas de los extremos actúan como un baño térmico de la cadena interna de osciladores. Por tal motivo pensamos promediar el sistema excluyendo las partículas de los extremos. Al observar el promedio sobre los modos normales (excluyendo las dos partículas del extremo) las distribuciones obtenidas no mostraron un cambio cualitativo importante en comparación con las distribuciones originales.

5) Simulaciones con diferente número de partículas

Una pregunta que nos surgió sobre los resultados anteriores es si éstos dependían del número de partículas, o sea de la paridad de N . Hicimos simulaciones con once partículas para cambiar la paridad de N y encontramos que el sistema seguía manteniendo el mismo comportamiento.

6) Simulación prolongada

Una duda que teníamos sobre nuestros resultados es si varía la distribución en forma cualitativa cuando el tiempo de simulación se prolonga más. Para quitarnos de duda, elegimos simular al sistema en un período largo con una distribución inicial al azar y energía $E/N=8.14$, verificando a diferentes tiempos cómo variaba dicha distribución. Según Bocchieri, a tal energía el sistema debería llegar a equipartición; sin embargo el resultado fué otro. La figura 4.80 muestra la distribución obtenida al tiempo $t=70$ y $t=1100$ (en períodos largos).

Tal parece de la gráfica de distribución, que la energía de los modos se conserva en forma aproximada. Esto nos confirma el hecho de que la cadena de osciladores con potencial L-J depende fuertemente de las condiciones iniciales.

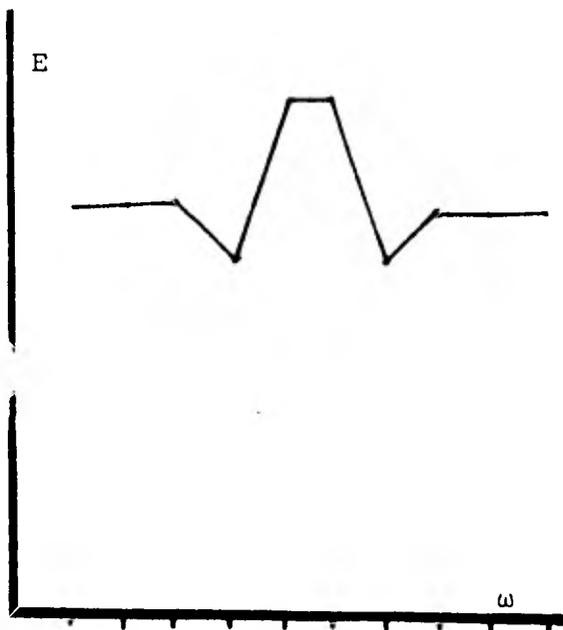
7) Simulaciones de verificación

Siempre que se realizan simulaciones numéricas se tiene la duda de que el sistema computacional no concuerde con la solución real del problema. En nuestro caso no teníamos la certeza de tener algún error en los programas, por lo cual decidimos hacer simulaciones de otros sistemas de cadenas de osciladores. Probamos en primer lugar la cadena armónica y comparamos los resultados con la solución exacta y en segundo lugar probamos el sistema de cadena de osciladores utilizado por Ford (21) descrito anteriormente. Para este último caso tomamos la cadena de cinco osciladores fuera de resonancia y en resonancia, comparando los resultados con los reportados por Ford (21). Para todas estas simulaciones coincidieron en forma muy aproximada con los resultados exactos o reportados.

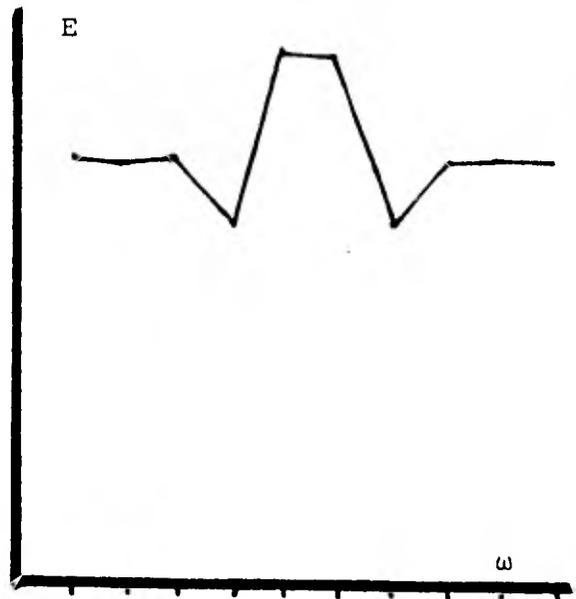
h) Conclusiones

En esta sección resumiremos los resultados obtenidos en las simulaciones que realizamos y los compararemos con los resultados de los trabajos discutidos anteriormente. En particular, haremos una serie de críticas sobre los trabajos de Bocchieri y Galgani.

1) A partir de las simulaciones realizadas y basándonos también en algunas inconsistencias (como la dependencia de excitar los primeros modos normales para obtener Planck, el uso de la energía total de los modos normales para promediar, etc.) de los trabajos de Galgani y Bocchieri, podemos decir que el sistema de cadena de osciladores con potencial Lennard-Jones es sensible a las condiciones iniciales (en la gama distribución en el sentido termodinámico. Como dijimos, el sistema tiene un



$T=70$
 $E/N=8.14$



$T=1100$
 $E/N=8.14$

Figura 4.80

comportamiento muy diferente si es excitado el primero o el último modo normal. Una explicación que podemos dar a este fenómeno es que cuando dos modos normales perturbados tiene la misma energía, es el modo de frecuencia más baja el que se verá más perturbado debido a que tiene que oscilar con mayor amplitud (hay que recordar que la energía es proporcional al cuadrado de la amplitud y de la frecuencia), por este razón los modos de mayor frecuencia oscilan con menor amplitud y por ende estarán oscilando en la parte lineal (o cercana) del potencial. Esto quiere decir que los modos altos conservarán más su energía, en cambio los modos bajos compartirán rápidamente la energía.

ii) No es posible hacer una afirmación rotunda de que la cadena de osciladores con potencial L-J sea sensible a las condiciones iniciales, ya que estamos basando tal afirmación en los resultados de un conjunto pequeño y limitado de simulaciones, cuyos resultados no concordaron con lo predicho por Bocchieri y Galgani. Para confirmar nuestras conclusiones es necesario demostrar que el sistema con potencial L-J es estable, esto quiere decir que cumple con las hipótesis del teorema de KAM. Si tal cosa es cierta, implicaría inmediatamente que el sistema no puede ser ergódico y que su comportamiento dependa fuertemente de las condiciones iniciales (debido a la estabilidad del sistema). Para cumplir las hipótesis del teorema de KAM deben satisfacerse las ecuaciones 3.445 y 3.446; esto implica que debemos encontrar los valores de las constantes enunciadas en 3.445 tal que acoten a la suma de las frecuencias por los enteros, entonces demostrando que tales constantes existen y que realmente la sumatoria queda acotada. Solamente así podremos afirmar que el sistema es estable. El utilizar la computadora para hacer todas las permutaciones de números enteros tales que la suma de sus módulos sea igual a un entero M (esto es para aplicarlo a la ecuación 3.445) puede llevarnos una cantidad enorme de tiempo de máquina (aun considerando simetrías), así que es necesario buscar un método analítico que simplifique el problema y podamos obtener tales constantes. En un trabajo realizado por Nishida {28} se demuestra formalmente que el sistema de FPU cumple con el teorema de KAM; sería interesante entonces aplicar tal método a nuestra cadena de osciladores y verificar si es estable el sistema.

iii) Si el teorema de KAM se cumple para la cadena con potencial L-J, entonces no pueda haber resonancias en el sistema; esto concuerda con las conclusiones de Ford en el sentido de que un sistema no resonante no puede llegar a equipartición. También podemos pensar que la cadena con potencial L-J tuviera un umbral de energía para la cual el sistema ya no cumpla con las hipótesis del teorema de KAM (energías muy altas); sin embargo parece que a las energías en que trabajamos este no es el caso, ya que a energías muy altas (mucho mayores que $E/N=27.5$) el potencial Lennard-Jones podría ser substituido por una pared de potencial, y recordando el ejemplo de Northcote, sólo se llega a equipartición si el sistema tiene tal energía que logra "chocar con la pared de potencial"; a energías más bajas el sistema se mantiene estable. En nuestro caso, que trabajamos a energías inferiores a $E/N=10$, estamos muy lejos de ese umbral y por lo tanto debemos considerar que no

violamos esa hipótesis del teorema de KAM.

iv) El trabajo de Galgani et al. muestra una grave inconsistencia debido a que la distribución que ellos obtienen depende fuertemente de la condición inicial. Por esta razón no tiene sentido hablar de distribución en este sistema. Consideramos pues que no es posible tener una distribución tipo Planck en este sistema tal como lo propone Galgani. Sin embargo faltaría demostrar que en una cadena de osciladores la única distribución posible es la equipartición de energía, pero si es posible demostrar que solamente se puede tener una distribución (en el sentido estadístico) cuando el sistema es ergódico, se podría demostrar que en un sistema cerrado la única distribución posible es la microcanónica.

v) También se debe investigar más acerca de los resultados de la mecánica estadística en sistemas mecánicos, como por ejemplo ver si se verifica el teorema del Virial en sistemas que poseen propiedades estadísticas.

5. Conclusiones

Para finalizar este trabajo de tesis haremos una recopilación de las conclusiones más importantes expuestas a través de los cuatro capítulos anteriores.

La visión actual de la mecánica no se limita solamente a resolver un sistema de ecuaciones diferenciales dadas las condiciones iniciales, sino que al incluir las ideas de ensemble, distribuciones y promedios aumenta sus posibilidades. En primer lugar pueden estudiar los fenómenos de estabilidad e inestabilidad de las ecuaciones diferenciales y de sus soluciones y junto con una formulación de la teoría ergódica, se pueden reconocer fenómenos azarosos e irreversibles cuyo origen es puramente mecánico. Aquí hemos estudiado sistemas mecánicos en que aparecen procesos estocásticos, para esto fué necesario seguir tres pasos:

- I) Identificar al "plano de corte" del sistema mecánico como el único medio posible para poder observar un comportamiento estocástico y ligar la idea de azar con el de inestabilidad.
- II) Estudiar el concepto de azar (restringido a una distribución uniforme) en sucesiones infinitas.
- III) Mostrar e utilizar los principales aspectos y teoremas de la teoría ergódica, asociándolos con los problemas de azar e inestabilidad.

De lo anterior se concluye que los conceptos de azar y determinismo en los sistemas mecánicos no son antagónicos, ya que eso depende del punto de vista que se adopte para observar al sistema, en particular depende del número de parámetros que se consideren en la observación del sistema mecánico.

La aplicabilidad de la mecánica clásica se ve acotada inferiormente por el micromundo. Como sabemos, solo la mecánica cuántica puede explicar correctamente los fenómenos que ahí ocurren. Por esta razón es sorprendente que Bocchieri et al. y Galgani et al. obtengan a partir de un sistema clásico una distribución de energía tipo Planck (en función de w), donde el sistema corresponde a una cadena de osciladores no lineales. Por las profundas repercusiones que esto traería sobre los fundamentos de la mecánica cuántica, nos decidimos a estudiar a fondo este problema.

Como antecedente para estudiar el comportamiento de las cadenas de osciladores anarmónicos, fue necesario conocer bajo que condiciones un oscilador anarmónico tiene un comportamiento inestable. Es importante determinar la estabilidad o inestabilidad de las soluciones de las ecuaciones de movimiento ya que solamente podemos asegurar una distribución de energía que dependa exclusivamente de las variables macroscópicas del sistema cuando éste se comporta de manera inestable.

Las conclusiones a las que llegamos sobre el estudio de osciladores anarmónicos las podemos resumir en dos párrafos:

- I) Solamente cuando el sistema de osciladores tiene resonancias y a su vez existe

traslape entre ellas, el sistema será azaroso e inestable.

ii) Cuando no existan resonancias de orden bajo en el sistema, éste tendrá un comportamiento estable. < > El siguiente paso fué recopilar los resultados de mecánica estadística y teoría ergódica referente a funciones de distribución en sistemas cerrados:

i) En mecánica estadística, cualquier distribución debe depender solamente de las variables macroscópicas.

ii) La mecánica estadística establece que un sistema cerrado solo puede tener un tipo de distribución, la microcanónica.

iii) En un sistema ergódico, la función de distribución es necesariamente uniforme.

A continuación se revisó la literatura para buscar trabajos relativos a cadenas de osciladores antecesoros del trabajo que estudiamos. Todos los trabajos que encontramos concuerdan con los resultados de mecánica estadística y con la teoría ergódica, no existen evidencias anteriores de haber obtenido una distribución que no sea la uniforme.

El hecho de no existir ningún antecedente que respalde los resultados del trabajo de Galgani et al. y Bocchieri et al. y al no concordar este trabajo con la mecánica estadística y con la teoría ergódica, nos motivó a repetir los cálculos numéricos con los que habían obtenido la distribución tipo Planck.

Después de una serie de simulaciones numéricas de la cadena de osciladores con potencial Lennard-Jones, con un número de partículas igual a $N=10$ y $N=11$, llegamos a la conclusión siguiente:

El sistema depende fuertemente de las condiciones iniciales y por lo tanto, no tiene sentido definir en dicho sistema algún tipo de distribución. < > Esta no fué de ninguna manera una demostración formal sobre la no existencia de una distribución tipo Planck en ésta cadena de osciladores, sin embargo, nuestros resultados nos marcan el camino a seguir para hacer una demostración formal, cuyos principales elementos a investigar serían:

i) Demostrar que el sistema de osciladores cumplen con el teorema de KAM.

ii) Mostrar explícitamente las frecuencias de resonancia, si existen, del sistema de osciladores.

Por último, sería interesante extender este tipo de investigación a cadenas de osciladores con cualquier tipo de potencial. Un punto de interés sería el mostrar que la única distribución posible en dichos sistemas es la uniforme y además que no es posible tener alguna distribución si el sistema no es al menos ergódico. Estas hipótesis nos llevarían a la idea de que las propiedades estadísticas de los sistemas mecánicos implican necesariamente ergodicidad. Además, utilizando esas hipótesis se podría determinar si un sistema es ergódico simplemente promediando en tiempos finitos algún parámetro, en particular el Virial.

Apéndice

A continuación mostramos los programas utilizados para realizar las simulaciones numéricas expuestas en el capítulo IV. El orden en que aparecen los listados corresponden a los siguientes programas:

- 1) Programa de inicialización de parámetros.

- 2) Programa de simulación numérica. Este programa utiliza una rutina de integración numérica llamada "AMSER", la cual está descrita en el libro de Gear {27}.

- 3) Programa de evaluación de los promedios temporales de la energía cinética de las partículas.

- 4) Programa de evaluación de los promedios temporales de la energía cinética de los modos normales, calculados a partir del número de partículas que se quieren considerar (esta parte del programa se utilizó para evaluar los efectos de borde).

Estos programas fueron escritos en FORTRAN IV-PLUS para el sistema operativo RSX11M V-5.1 en una máquina PDP-11/34A con procesador de punto flotante.

27-ene-81 20 19:37

INICIA.TXT

pagina 1

```

IMPLICIT REAL*8 (A-H,Q-Z)
COMMON /NUMEC/TKK,DOS6,NUM
COMMON /ENER/ICONT
DIMENSION Y(40,8),GUARDA(40,10),YMAX(40,10),Z(20),RPF(20)
DIMENSION ERROR(40),PW(40,40),IRS(40,4)
DIMENSION ENPROM(20)
OPEN(UNIT=5,NAME='TI ')
OPEN(UNIT=6,NAME='T1 ')
OPEN(UNIT=3,NAME='LP: ')
C*****
C*
C* LECTURA DE DATOS. SE PIDE EL NUMERO DE MASAS,
C* TIEMPO DE INICIO,CONDICIONES INICIALES,
C* VALORES MAX. DE LAS VARIABLES, PASOS MI-
C* NIMOS Y MAXIMOS DE INTEGRACION, METODO DE
C* INTEGRACION Y CUANTAS ITERACIONES SE QUIE-
C* REN Y CON QUE PRECISION.
C*****
XPI=3.141592654DD
DOS6=2 ODO**(1/6)
WRITE(6,1)
1 FORMAT(2X,'NUMERO DE MASAS')
READ(5,3) NUM
2 FORMAT(14)
WRITE(6,2)
2 FORMAT(3X,'TIEMPO INICIAL Y FINAL')
READ(5,450) TI,TF
450 FORMAT(2F10,5)
WRITE(6,450)TI,TF
WRITE(6,310)
310 FORMAT(3X,'VALORES INICIALES EN MODO NORMAL (SI=1)')
READ(5,3)IDATO
315 FORMAT(2X,'VALORES INECIALES DE Q(1) Y P(1) EN MODO NORMAL')
3 FORMAT(2X,'VALORES INICIALES DE Y(1) Y P(1)')
DO 30 I=1,NUM
  K=1
  IF(IDATO.NE.1)GO TO 320
  K=2
  WRITE(6,315)
  GO TO 330
320 WRITE(6,5)
330 READ(5,450) Y(2*I-1,K),Y(2*I,2)
  WRITE(6,450) Y(2*I-1,K),Y(2*I,K)
30 CONTINUE
  IF(IDATO.NE.1)GO TO 335
  DO 340 I=1,NUM
    SUMY=0
    SUMP=0
    DO 351 J=1,NUM
      SUMY=SUMY+DSIN((I+J*XPI)/(NUM+1))*Y(2*J-1,2)
      SUMP=SUMP+DSIN((I+J*XP)/(NUM+1))*Y(2*J,2)
351 CONTINUE
      Y(I*2-1,1) = DSQRT(2 ODO/(NUM+1))*SUMY
      Y(I*2,1) = DSQRT(2 ODO/(NUM+1))*SUMP
      WRITE(6,345) Y(I*2-1,1),Y(I*2,1)
345 FORMAT(2X,'Y= ',D13,5,'P= ',D13,5)
340 CONTINUE
  WRITE(6,6)
  6 FORMAT(2X,'DAME PASO INICIAL, EL MINIMO Y MAXIMO')
  READ(5,451) H,HMIN,HMAX
  451 FORMAT(3F15,10)
  WRITE(6,451)H,HMIN,HMAX
  WRITE(6,8)
  8 FORMAT(2X,'DAME ERROR PERMITIDO POR PASO ')
  READ(5,452) ESP
  452 FORMAT(F15,8)
  DO 37 JJ=1,NUM
    I=JJ*2
    WRITE(6,16)

```

27-ene-81 20:19:54

INICIA.TXT

pagina 2

```

15     FORMAT(4X, 'Y-maxima Y P-maxima ')
37     READ(5,450) YMAX(I-1),YMAX(I)
CONTINUE
WRITE(6,9)
9     FORMAT(2X, 'DAME METODO 0-ADAMS, 1 Y 2 GEAR. Y MAX. ORDEN DE K')
453    READ(5,453) MF,MAXDER
454    FORMAT(2I5)
10     FORMAT(2I2)
WRITE(6,11)
11     FORMAT(2X, 'DAME CONSTANTE DEL RESORTE')
READ(5,452) TKK
WRITE(6,41)
454    READ(5,454) LOOP1, LOOP0, LOOPE
41     FORMAT(3X, 'NUM. DE ITERACIONES POR CALCULO, NUMERO DE CALCULOS ',
*      //, 'Y NUMERO DE ARCHIVOS')
C*****
C*
C* EN ESTA PARTE SE IMPRIMEN LOS DATOS Y CON-
C* DICIONES INICIALES EN EL PERIFERICO QUE
C* SE HALLA SELECCIONADO (FILE 7)
C*
C*****
WRITE(3,21) NUM,TKK
XL00PO=DFLOAT(LOOP0)
XL0OPE=DFLOAT(LOOPE)
XTAM=XL00PO/XL0OPE
ITAMA=IDINT(XTAM)
ITAM=ITAMA*NUM + 5*NUM
21     FORMAT(5X, 'NUMERO DE MASAS = ',I3,5X, 'CONSTANTE DEL RES. = ',
*      D10.5, //)
CALL ENERGI(Y,I,TOT)
WRITE(3,29) TOT
29     FORMAT(5X, 'ENERGIA DEL SISTEMA = ',D13.5, //)
WRITE(6,29) TOT
WRITE(3,22) TI,TF
22     FORMAT(5X, 'TIEMPO INICIAL = ',D10.5, 'TIEMPO FINAL = ',D10.5, //)
DO 42 I=1,NUM
WRITE(3,23) I,Y(2*I-1,1),Y(2*I,1)
WRITE(3,24) YMAX(2*I-1),YMAX(2*I)
23     FORMAT(7X, 'MASA ',I2, ' Y-INICIAL = ',D13.5,
*      ' P-INICIAL = ',D13.5, //)
24     FORMAT(16X, 'Y-MAXIMA = ',D13.5,5X, 'P-MAXIMA = ',D13.5, //)
42     CONTINUE
IF(IDATO.NE.1) GO TO 365
WRITE(3,366)
366    FORMAT(///,5X, 'CONDICIONES INICIALES DE MODOS NORMALES', //)
DO 367 J=1,NUM
WRITE(3,368) J,Y(2*J-1,2),Y(2*J,2)
368    FORMAT(/,4X, 'MODO= ',I2,3X, 'Q= ',D13.5,
*      3X, 'P= ',D13.5, //)
367    CONTINUE
365    WRITE(3,26) H,HMIN,HMAX
26     FORMAT(///,5X, 'PASO INICIAL= ',D15.8, 'PASO MINIMO= ',D15.8,
*      ' PASO MAXIMO= ',D15.8, //)
WRITE(3,27) ESP,MF,MAXDER
27     FORMAT(6X, 'MAXIMO ERROR= ',D10.5,5X, 'METODO (0=ADAMS)',I2,
*      5X, 'MAXIMO ORDEN = ',I2, //)
WRITE(3,81) LOOP1,LOOP0
81     FORMAT(5X, 'NUMERO DE ITERACIONES POR CALCULO DE ENERGIA = ',
*      I5, //,5X, 'TOTAL DE CALCULOS DE ENERGIAS= ',
*      I5, //, //)
C*****
C*
C* ESTA PARTE CALCULA LOS PARAMETROS INICIALES
C* DE LOS MODOS NORMALES DE OSCILACION, CALCUL-
C* LA LAS CONSTANTES CIJJ (AMPLITUD),WEJJ (FRE-
C* CUENCIA) Y DEJJ (FASE) DE LA ECUACION:
C*

```

27-ene-81 20:20:12

INICIA FX!

pagina 3

```

C*          YC(J) = C(I) COSENO( W(I)*T + P(J))
C*****
WRITE(3,210)
210  FORMAT(777,3X,'CARACTERISTICAS DE LOS MODOS NORMALES',77)
DO 350 J=1,NUM
  SUMY=0
  SUMP=0
  DO 200 J=1,NUM
    SUMY=SUMY+DSIN((1+J)*XP1)/(NUM+1)*Y(2*J-1,1)
    SUMP=SUMP+DSIN((1+J)*XP1)/(NUM+1)*Y(2*J,1)
200  CONTINUE
    SUMY=DSGRT(2.0D0/(NUM+1))*SUMY
    SUMP=DSGRT(2.0D0/(NUM+1))*SUMP
    WFREC=DSGRT(4.0D0*TKK)*DSIN((1+XP1)/(2.0D0*(NUM+1)))
    IF(SUMY.NE.0.0) GO TO 350
    FASE=XP1/2
    CNST=-SUMP/WFREC
    GO TO 370
350  FASE=DATAN(-SUMP/(WFREC*SUMY))
    CNST=SUMY/DCOS(FASE)
370  WRITE(3,380)I,CNST,FASE,WFREC
380  *  FORMAT(5X,'MODOS= ',13,5X,'CNST= ',1,D13.5,
    *  5X,'FASE= ',1,D13.5,3X,'FREC= ',1,D13.5,/)
390  *  CONTINUE
C*****
C*  GUARDA DATOS INICIALES EN DISCO
C*****
OPEN(UNIT=4,NAME='DV STATUS DATA',
  *  FORM='UNFORMATTED',
  *  RECORDSIZE=4,MAXREC=NUM*2+5)
WRITE(4)NUM,MF,MAXDER,LOOP1,LOOPD,LOOPE,MODI,OP,MARCH
WRITE(4)ITAMA,ITAM,C,C,C,C,C,C
WRITE(4)T,ESP
WRITE(4)TKK,H
WRITE(4)HMIN,HMAX
DO 400 I=1,NUM
  WRITE(4) Y(I*2-1,1),Y(I*2,1)
400  CONTINUE
DO 420 I=1,NUM
  WRITE(4) YMAX(I*2-1,1),YMAX(I*2,1)
420  CONTINUE
CLOSE(UNIT=5)
STOP
END
C*****
C*
C*  SUBROUTINA QUE CALCULA LA ENERGIA DEL SISTEMA
C*  ESCOJIDO... O SEA, EL TIPO DE POTENCIAL QUE
C*  SE ESTE TRABAJANDO. EN ESTE CASO ES TIPO
C*  LENNARD-JONES
C*****
SUBROUTINE ENERGI(Y,T,TOT)
  IMPLICIT REAL *8 (A-H,G-Z)
  COMMON /NUMEC/TKK,DOS6,NUM
  DIMENSION Y(40,8)
  ENER1=0.0
  TEM6=(DOS6+Y(1,1))**(-6)
  ENER2=(1-TEM6)*TEM6
  DO 50 I=1,NUM-1
    II=I+2
    ENER1=ENER1 + Y(II,1)**2
    TEM6=(DOS6+Y(II+1,1))-Y(II-1,1)**(-6)
    ENER2=ENER2+(1-TEM6)*TEM6
50  CONTINUE
  ENER1=ENER1+Y(2*NUM,1)**2
  TEM6=(DOS6-Y(2*NUM-1,1))**(-6)
  ENER2=ENER2+(1-TEM6)*TEM6
  TOT=ENER1/2 - (TKK/6.0)*ENER2
  RETURN
END

```

27-ene-81 20:20:55

SIMULA.TXT

pagina 1

```

IMPLICIT REAL*8 (A-H, G-Z)
REAL *4 GT, GY, GP
COMMON /NUMEC/TKK, DOS6, NUM
COMMON /ENER/ICONT
DIMENSION Y(40, 8), GUARDA(40, 17), YMAX(40), GG(20), RPP(20)
DIMENSION ERROR(40), PW(40, 40), IRS(40, 4)
DIMENSION ENPROM(20)
OPEN(UNIT=3, NAME='TI ')
C+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****
C+
C+      PROGRAMA DE SIMULACION NUMERICA
C+      DE UNA CADENA DE OSCILADORES
C+      ANARMONICOS CON POTENCIAL
C+      TIPO LENNARD-JONES
C+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****
C+
C+      XPI=3.141592654DO
C+      DOS6=2.ODO** (1/6)
C+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****
C+
C+      LECTURA DE LOS PARAMETROS INICIALES
C+      CREADOS EN DISCO POR EL PROGRAMA
C+      "INICIA LJD" O POR ESTE MISMO
C+      PROGRAMA CUANDA TERMINA UNA
C+      SIMULACION NUMERICA.
C+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****
C+
C+      OPEN(UNIT=5, NAME='DV:STATUS.DAT',
C+      *      FORM='UNFORMATTED', TYPE='OLD',
C+      *      RECORDSIZE=4, MAXREC=NUM*2+5)
C+      READ(5) NUM, MF, MAXDER, LOOPI, LOOPO, LOOPE, MODLOP, NARCH
C+      READ(5) ITAMA, ITAM, K, K, K, K, K, K, K
C+      READ(5) T, ESP
C+      READ(5) TKK, HINI
C+      READ(5) HMIN, HMAX
C+      DO 600 I=1, NUM
C+      *      READ(5) Y(I*2-1, 1), Y(I*2, 1)
600   CONTINUE
C+      DO 620 I=1, NUM
C+      *      READ(5) YMAX(I*2-1), YMAX(I*2)
620   CONTINUE
C+      CLOSE(UNIT=5)
C+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****
C+      INICIO DE PARAMETROS
C+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****
C+      NG=0
C+      H=HINI
C+      DO 36 I=1, NUM
C+      *      ENPROM(I)=0
36    CONTINUE
C+      MODLOP=ITAMA
C+      CALL ENERGI(Y, I, TOT)
C+      WRITE(3, 80) TOT
80    FORMAT(57, 'ENERGIA TOTAL DEL SISTEMA= ', D13.5)
C+      OPEN(UNIT=4, NAME='DV:DIV.DAT',
C+      *      FORM='UNFORMATTED', RECORDSIZE=3,
C+      *      MAXREC=ITAM)
C+      WRITE(4) FLOAT(NUM), FLOAT(ITAMA), 0.0
C+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****+*****
C+
C+      LOOP DE INTEGRACION, INTEGRA LAS ECUACIONES
C+      DIFERENCIALES QUE SE ENCUENTRAN EN EL
C+      FUNCION "DIFFUN" LLAMANDO (PASO POR PASO)
C+      A LA RUTINA AMGEAR (ADAMS&GEAR). LA LLAMA
C+      LOOPO+LOOPI VECES.
C+      CADA LOOPI VECES CALCULA LAS ENERGIAS Y
C+      VALORES DE LOS MODOS NORMALES Y DE LAS MASAS,
C+      ESCRIBIENDO A DISCO ALGUNOS PARAMETRO QUE SE
C+      DESEEN GRAFICAR.

```


27-ene-81 20:21:29

SIMULA.TXT

pagina 3

```

C* -----
C*      DT      DY      DT      DP
C*
C*      AQUÍ Y(1) ES SI I ES PAR, ENTONCES
C*      ES EL (I/2) ESIMO MOMENTO, SI I ES NON ES LA
C*      (I/2 + 1) ESIMA POSICION
C*
C* *****
C*      SUBROUTINE DIFFUN (X, Y, DY)
C*      IMPLICIT REAL *8 (A-H, Q-Z)
C*      COMMON /NUMEC/TKK, DOS6, NUM
C*      DIMENSION Y(40), DY(40)
C*      DY(1)=Y(2)
C*      TEM1B=1/(DOS6+Y(3)-Y(1))
C*      TEM1A=1/(DOS6+Y(1))
C*      TEM3B=TEM1B*TEM1B*TEM1B
C*      TEM6B=TEM3B*TEM3B
C*      TEM3A=TEM1A*TEM1A*TEM1A
C*      TEM6A=TEM3A*TEM3A
C*      DY(2)=TKK*(-(1-2*TEM6A)*TEM6A*TEM1A
C*      *(1-2*TEM6B)*TEM6B*TEM1B)
C*
C*      DO 10 I1=2, NUM-1
C*          I=I1+2
C*          DY(I-1)=Y(I)
C*          TEM1A=TEM1B
C*          TEM6A=TEM6B
C*          TEM1B=1/(DOS6+Y(I+1)-Y(I-1))
C*          TEM3B=TEM1B*TEM1B*TEM1B
C*          TEM6B=TEM3B*TEM3B
C*          DY(I)=TKK*(-(1-2*TEM6A)*TEM6A*TEM1A
C*          *(1-2*TEM6B)*TEM6B*TEM1B)
10
C*      CONTINUE
C*      DY(2*NUM-1)=Y(2*NUM)
C*      TEM1A=TEM1B
C*      TEM6A=TEM6B
C*      TEM1B=1/(DOS6-Y(2*NUM-1))
C*      TEM3B=TEM1B*TEM1B*TEM1B
C*      TEM6B=TEM3B*TEM3B
C*      DY(2*NUM)=TKK*(-(1-2*TEM6A)*TEM6A*TEM1A
C*      *(1-2*TEM6B)*TEM6B*TEM1B)
C*
C*      RETURN
C*      END
C* *****
C*
C*      SUBROUTINA QUE CALCULA LA ENERGIA DEL SISTEMA
C*      ESCOJIDO U SEA, EL TIPO DE POTENCIAL QUE
C*      SE ESTE TRABAJANDO.
C*
C* *****
C*      SUBROUTINE ENERGI (Y, T, TOT)
C*      IMPLICIT REAL *8 (A-H, Q-Z)
C*      COMMON /NUMEC/TKK, DOS6, NUM
C*      DIMENSION Y(40, 8)
C*      ENER1=0.0
C*      TEM6=(DOS6+Y(1, 1))*(-6)
C*      ENER2=(1-TEM6)*TEM6
C*      DO 30 I=1, NUM-1
C*          I1=I+2
C*          ENER1=ENER1 + Y(I1, 1)**2
C*          TEM6=(DOS6+Y(I1+1, 1)-Y(I1-1, 1))*(-6)
C*          ENER2=ENER2+(1-TEM6)*TEM6
30
C*      CONTINUE
C*      ENER1=ENER1+Y(2*NUM, 1)**2
C*      TEM6=(DOS6-Y(2*NUM-1, 1))*(-6)
C*      ENER2=ENER2+(1-TEM6)*TEM6
C*      TOT=ENER1/2 - (TKK/6.0)*(ENER2)
C*      RETURN
C*      END
C* *****
C*
C*      SUBROUTINA NULA

```

27-ene-81 20:21:46

SIMULA.TXT

pagina 4

```
C*****  
SUBROUTINE DERIVACT(Y,PW,M)  
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)  
DIMENSION Y(40),PW(M,M)  
WRITE(3,1)  
1  FORMAT(5X,'FINQUE HAGO AG.1700')  
STOP  
END
```

27-ene-81 20:22:18

PROM.TXT

pagina 1

```

C*****
C*
C*   PROGRAMA PARA CALCULAR LOS PROMEDIOS
C*   TEMPORALES DE LA ENERGIA CINETICA
C*   DE LAS PARTICULAS Y LA ENERGIA TOTAL.
C*   TOMA LOS DATOS DE LOS ARCHIVOS DE DATOS
C*   CREADOS POR EL PROGRAMA "SIMULA.LJD"
C*   Y CREA 20 ARCHIVOS DE SUBPROMEDIOS
C*   PARA SACAR A GRAFICACION
C*****
C*   IMPLICIT REAL*4 (A-G)
C*   REAL *4 Y(40), EPROM(40)
C*   LOGICAL*1 HAR(20)
C*   COMMON /NUMEC/TKK, DOS6, NUM, INF, ISUP
C*   TKK=660.0
C*   DOS6=2.0**(.178)
C*   ENER1=0.0
C*   ENER2=0.0
C*   CALL ASSIGN(3, 'DV: DATA.MOD')
C*   CALL ASSIGN(4, 'DV: NOMBRE.DAT')
C*   CALL ASSIGN(5, 'TI')
C*   WRITE(5, 212)
112  FORMAT(1, 'DA EL VALOR DE LA CONSTANTE DEL RESORTE')
214  READ(5, 214)TKK
214  FORMAT(F11.5)
300  WRITE(5, 200)
300  FORMAT(1, 'DA PRIMERA Y ULTIMA PARTICULA')
210  READ(5, 210)I1=1, ISUP
210  FORMAT(I13)
    DO 710 J=1, 20
      ENER1=0
      ENER2=0
      DO 75 J=1, 40
        EPROM(J)=0
75    CONTINUE
      READ(4, 140) (HAR(K), K=1, 20)
140  FORMAT(20A1)
      CALL ASSIGN(2, HAR, 14)
      DEFINE FILE 2(10000, 6, U, IXX)
      I=2
      READ(2, 1) ANUM, ALCOOP
      NUM=INT(ANUM)
      LOOP=INT(ALCOOP)
      DO 20 K=1, LOOP
        DO 30 J=1, NUM
          JJ=J+2
          READ(2, 1, ERR=60) ATIM, Y(JJ-1), Y(JJ)
          I=I+1
          EPROM(J)=EPROM(J)+Y(JJ)**2
30    CONTINUE
      CALL ENERGI(Y, ATIM, TOT)
      ENER1=ENER1+TOT
      ENER2=ENER2+TOT**2
160  WRITE(2, 160)TOT
160  FORMAT(5X, 'ENER=', F15.8)
20  CONTINUE
      READ(2, 2, ERR=60) AINI, Y(1), Y(2)
      WRITE(2, 170)AINI, ATIM
170  FORMAT(2F15.8)
      DO 40 L=1, ISUP-INF+1
        WRITE(3, 110)L, EPROM(L)/(LOOP**2)
110  FORMAT(14, F15.8)
40  CONTINUE
      WRITE(3, 120)ENER1/LOOP
120  FORMAT(F15.8)
      ASIG=(ENER2-(ENER1**2)/ALCOOP)/(ALCOOP-1.0)
180  WRITE(3, 180)ASIG
180  FORMAT(F15.8)
      CLOSE(UNIT=2)

```

27-ene-81 20:22:35

FROM TTY

pagina 2

```

110 CONTINUE
    CLOSE(UNIT=3)
    CLOSE(UNIT=4)
    STOP 'FIN'
50 STOP 'ERROR'
100 FORMAT(4X, 'NUM=', I9, 3X, 'LOOP=', I9)
    END

*****
C*+
C*+ SUBROUTINA QUE CALCULA LA ENERGIA DEL SISTEMA
C*+ ESCOJIDO O SEA, EL TIPO DE POTENCIAL QUE
C*+ SE ESTE TRABAJANDO.
C*+
*****
SUBROUTINE ENERG1(Y, T, TOT)
  IMPLICIT REAL *4 (A-H, G-Z)
  COMMON /NUMEC/TKK, DOS6, NUM, INF, IOUT
  DIMENSION Y(40)
  ENER1=0.0
  TEM6=(DOS6+Y(1))**(-6)
  ENER2=(1-TEM6)*TEM6
  DO 50 I=1, NUM-1
    I1=I+2
    ENER1=ENER1 + Y(I1)**2
    TEM6=(DOS6+Y(I1+1)-Y(I1-1))**(-6)
    ENER2=ENER2+(1-TEM6)*TEM6
50 CONTINUE
  ENER1=ENER1+Y(2*NUM)**2
  TEM6=(DOS6-Y(2*NUM-1))**(-6)
  ENER2=ENER2+(1-TEM6)*TEM6
  TOT=ENER1/2 - (TKK/6.0)*(ENER2)
  RETURN
  END

```

27-ene-81 20:22:55

MODOP.TXT

pagina 1

```

C*****
C*
C*   PROGRAMA QUE CALCULA LOS PROMEDIOS
C*   DE LA ENERGIA CINETICA DE LOS
C*   MODOS NORMALES. PUEDE CALCULAR LOS
C*   PROMEDIOS CONSIDERANDO UN NUMERO
C*   DE PARTICULAS MENOR QUE N PARA
C*   CALCULAR LA DISTRIBUCION DE ENERGIA
C*   SIN CONSIDERAR LAS PARTICULAS DE LOS
C*   EXTREMOS (POR EJ.). LEE LOS DATOS
C*   DE DISCO DE LOS ARCHIVOS CREADOS
C*   POR EL PROGRAMA "SIMULA LUD" Y
C*   CREA 20 SUBPROMEDIOS PARA SACARLOS
C*   A GRAFICACION
C*****
C*   IMPLICIT REAL*4 (A-G)
C*   REAL *4 Y(40), PP(20), GG(20), EPROM(40)
C*   LOGICAL*1 HAR(20)
C*   COMMON /NUMEC/TKK, DOS6, NUM, INF, ISUP
C*   COMMON /PUNTO/Y, PP, GG
C*   TKK=660.0
C*   DOS6=2.0*(1/6)
C*   ENER1=0.0
C*   ENER2=0.0
C*   CALL ASSIGN(3, 'DV: DATA MOD')
C*   CALL ASSIGN(4, 'DV: NOMBRE. DAT')
C*   CALL ASSIGN(5, 'TI ')
C*   WRITE(5, 212)
E12  FORMAT(' DA LA CONTANTE DEL RESORTE ')
E14  READ(5, 214)TKK
E14  FORMAT(F11.5)
E14  WRITE(5, 200)
E14  FORMAT(4X, 'DA PRIMERA Y ULTIMA PARTICULA')
E14  READ(5, 210)INF, ISUP
E10  FORMAT(213)
E10  DO 70 I=1, 20
E10  ENER1=0
E10  ENER2=0
E10  DO 75 J=1, 40
E10  EPROM(J)=0
E10  CONTINUE
E10  READ(3, 140) (HAR(K), K=1, 20)
E10  FORMAT(20A1)
E10  CALL ASSIGN(2, HAR, 14)
E10  DEFINE FILE 2(10000, 6, 0, IXX)
E10  I=2
E10  READ(2, 1)ANUM, ALDOP
E10  NUM=INT(ANUM)
E10  LOPP=INT(ALDOP)
E10  DO 20 K=1, LOOP
E10  DO 30 J=1, NUM
E10  JJ=J+2
E10  READ(2, 1, ERR=60)ATIM, Y(JJ-1), Y(JJ)
E10  I=I+1
E10  CONTINUE
E10  CALL ENERGI(Y, ATIM, TOT)
E10  ENER1=ENER1+TOT
E10  ENER2=ENER2+TOT**2
E10  WRITE(2, 160)TOT
E10  FORMAT(5X, 'ENER=' , F15.6)
E10  CALL MODO
E10  DO 35 J=1, ISUP-INF+1
E10  EPROM(J)=EPROM(J)+PP(J)**2
E10  CONTINUE
E10  CONTINUE
E10  READ(2, 2, ERR=60)AINI, Y(1), Y(2)
E10  WRITE(3, 170)AINI, ATIM
E10  FORMAT(2F15.8)
E10  DO 40 L=1, ISUP-INF+1

```

```

110      WRITE (3, 110) (EPROM(L), L=LOOP*2)
120      FORMAT (14, F15.8)
130      CONTINUE
140      WRITE (2, 120) ENER1/LOOP
150      FORMAT (F15.8)
160      A=1+ENER2-(ENER1**2)/LOOP/(LOOP-1.0)
170      WRITE (3, 180) A*10
180      FORMAT (F15.8)
190      CLOSE (UNIT=3)
200      CONTINUE
210      CLOSE (UNIT=3)
220      CLOSE (UNIT=4)
230      STOP 'FIN'
240      STOP 'ERROR'
250      FORMAT (4X, 'NUM=', I9, 3X, 'LOOP=', I9)
260      END
C*****
C
C SUBROUTINA QUE CALCULA LA ENERGIA DEL SISTEMA
C ESCOJIDO P SEA, EL TIPO DE POTENCIAL QUE
C SE ESTE TRABAJANDO
C*****
C SUBROUTINE ENERGY (Y, T, TOT)
C IMPLICIT REAL *4 (A-H,O-Z)
C COMMON /NUMEC/TKK,DOG5,NOM,INF,ISUP
C DIMENSION Y(40)
C ENER=0.0
C TEM5=DOG5*Y(1)**2
C ENER2=1-TEM5-TEM5
C DO 50 II=1, NOM-1
C   TEM5=
C   ENER1=ENER1 + Y(II)**2
C   TEM5=DOG5*(Y(II+1)-Y(II))**2
C   ENER2=ENER2 + (TEM5)*TEM5
50  CONTINUE
C ENER1=ENER1 + (2*NOM)**2
C TEM5=(DOG5*(2*NOM-1))**2
C ENER2=ENER2 + (TEM5)*TEM5
C TOT=ENER1/2 + (TKK/6.0)*(ENER2)
C RETURN
C END
C*****
C LOOP DE CALCULO DE POSICION, MOMENTO Y ENERGIAS
C (CINETICA, POTENCIAL Y TOTAL) DE CADA MODO NORMAL
C*****
C SUBROUTINE MODO
C REAL *4 TKK,DOG5
C REAL *4 Y(40),RPP(20),QQ(20)
C COMMON /NUMEC/TKK,DOG5,NOM,INF,ISUP
C COMMON /PUNTO/ZY,RPP,QQ
C XPI=3.14159
C ENER=0.0
C DO 52 II=1, ISUP-INF+1
C   RPP(II)=0
C   QQ(II)=0
C   DO 53 III=1, ISUP-INF+1
C     IV=III+INF-1
C     XX=5IN(.314159*III*XPI)/(ISUP-INF+2)
C     RPP(III)=RPP(III) + XX*Y(2*IV)
C     QQ(III)=QQ(III) + XX*Y(2*IV-1)
53  CONTINUE
C   QQ(II)=QQ(II)*SQRT(2.0/(ISUP-INF+2))
C   RPP(II)=RPP(II)*SQRT(2.0/(ISUP-INF+2))
C   ENER1=RPP(II)**2/3
C   ENER2=TKK*5IN(.314159*(2*(ISUP-INF+2)))**2*QQ(II)**2
52  ENER2=2*(2/3)*3*ENER2
52  CONTINUE
C RETURN
C END

```

- 6
Goldstein, H.
"Classical Mechanics"
Addison-Wesley, Reading, Mass. 1965
- 7
Farquhar, I. E.
"Ergodic Theory of Statistical Mechanics"
Wiley-International, N. York 1965
- 8
Terletsii, Ya. P.
"Statistical Physics"
North-Holland Publishing, Amsterdam 1971
- 9
Lebowitz, J.; Penrose, O.
"Modern Ergodic Theory"
Physics Today, February 1973
- 10
H'eron, M.; Helles, C.
"The Applicability of the Third Integral of Motion:
Some Numerical Experiments"
The Astronomical Journal, Vol. 69 No. 1 1964
- 11
Chirikov, B. V.; Zaslavskii
"Stochastic Instability of Non-linear Oscillation"
Soviet Physics Uspekhi, Vol. 14 No. 5 1972
- 12
Izrael'ev, F. M.; Chirikov, B. V.
"Statistical Properties of Non-linear String"
Soviet Physics Doklady, Vol. 11 No. 1 1966

- 13
Landau, L.; Lifshitz, E.
"Mec'anica"
Ed. Reverté, Barcelona 1975
Vol. 1
- 14
Ford, J.
"A Picture Book of Stochasticity"
Reprint
- 15
Ford, J.; Walker, G. H.
"Amplitude Instability and Ergodic Behavior
for Conservative Nonlinear Oscillator System"
Physical Review, Vol. 188 No. 1 1969
- 16
Chirikov, B. V.
"Research Concerning the Theory of Non-linear
Resonance and Stochasticity"
CERN Trans. 71-40, Geneva 1971
- 17
Ford, J.; Linsford, G.
"Stochastic Behavior of Resonant Nearly Linear
Oscillator Systems in the Limit of Zero Nonlinear
Coupling"
Physical Review A, Vol. 1 No. 1 1970
- 18
Moser, J.
"Nearly Integrable and Integrable Systems"
AIP Conference Proceedings, No. 46 1978

19

Ford, J.
"The Transition from Analytic Dynamics to
Statistical Mechanics"
Offprints from Advances in Chemical Physics,
Vol. XXIV 1973

20

Galgani, L.; Scotti, A.
"Recent Progress in Classical Nonlinear Dynamics"
Rivista del Nuovo Cimento, Vol. 2 No. 2 1972

21

Ford, J.; Waters, J.
"Computer Studies of Energy Sharing and Ergodicity
for Nonlinear Oscillator System"
Journal of Mathematical Physics, Vol. 4 No. 10 1963

22

Galgani, G.; Benettin, G.; Casartelli, M.; Strelcyn, J.
"On the Reliability of Numerical Studies of Stochasticity.
I: Existence of the Time Averages"
Nuovo Cimento, Vol. 44B No. 1B3 1978

23

Bocchieri, P.; Scotti, A.; Bearzi, B.; Longo, A.
"Anharmonic Chain with Lennard-Jones Interaction"
Physical Review A, Vol. 2 No. 5 1970

24

Fermi, E.; Pasta, J.; Ulam, S.
"Studies of Non Linear Problems"
E. Fermi Collected Paper, Univ. of Chicago Press
Chicago 1955

25

Northcote, R.; Potts, R.

"Energy Sharing and Equilibrium for Nonlinear Systems"

Journal of Mathematical Physics, Vol. 5 No. 3 1964

26

Galvani, L., Scotti, A.

"Planck-like Distribution in Classical Nonlinear Mechanics"

Physical Review Letters, Vol. 28 No. 18 1972

27

Gear, W.

**"Numerical Initial Value Problems in Ordinary
Differential Equation"**

Prentice Hall, 1971

28

Mehida, T.

Memoirs of Faculty of Engineering

Kyoto Univ. 1971