



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS
MATEMÁTICAS Y DE LA ESPECIALIZACIÓN EN ESTADÍSTICA
APLICADA

OSCILACIONES LOCALIZADAS EN CADENAS NO LINEALES Y APLICACIONES EN
BIOMOLÉCULAS

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS MATEMÁTICAS

PRESENTA:
FRANCISCO JAVIER MARTÍNEZ FARÍAS

DIRECTOR
DR. PANAYOTIS PANAYOTAROS, [IIMAS](#), [UNAM](#)

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR
DR. ARTURO OLVERA CHÁVEZ, [IIMAS](#), [UNAM](#)
DR. CARLOS L. PANDO LAMBRUSCHINI, [I. F.](#), [BUAP](#)

CIUDAD DE MÉXICO, CD. MX FEBRERO DE 2016



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

A GRADEZCO a las personas que me apoyaron para concluir este trabajo, mis padres, hermanos, profesores y amigos, en especial al Dr. Panayotis Panayotaros, por su paciencia y dedicación. Esta tesis fue realizada gracias al apoyo del CONACYT, el Posgrado de Matemáticas de la UNAM y el IIMAS.

Índice general

1. Introducción	4
2. Modelo de Red Elástica no Lineal	8
2.1. Análisis de conectividad y modos normales del modelo FPU cuártico	13
2.1.1. Representación en variables desacopladas para el problema lineal	14
2.1.2. Representación de la parte cuártica del Hamiltoniano en variables \mathbf{Q} y \mathbf{P}	17
2.2. Representación espectral del modelo FPU cuártico	19
2.2.1. Conservación del momento total	19
2.2.2. Representación en variables espectrales	22
3. Análisis espectral de la matriz de conectividad para diferentes configuraciones	27
3.1. Cálculo de frecuencias y Modos Normales de Vibración armónicos	27
3.2. Estudio numérico de los modos normales	30
4. Formas Normales de Birkhoff: subespacios invariantes y localización	47
4.1. Introducción a las formas normales de Birkhoff	47
4.1.1. Transformaciones simplécticas	49
4.1.2. Forma normal de Birkhoff y resonancias	52
4.2. Subespacios invariantes: caso con banda de separación (gap)	53
4.3. Subespacio invariante: caso general	57
4.4. Órbitas periódicas en el subespacio V_+ y su estabilidad	63
4.4.1. Determinación de órbitas periódicas a partir de puntos críticos en la esfera $\mathcal{P} = \mathcal{C}$	65
4.5. Estabilidad lineal de las soluciones oscilatorias	71
5. Integración numérica, localización y estabilidad	77
5.1. Métodos de integración	78
5.1.1. Método de Runge Kutta	78
5.1.2. Implementación de Störmer-Verlet	79
5.1.3. Método Simpléctico PEFRL	80
5.2. Precisión y calibración	81
5.2.1. Prueba de conservación de la energía y el momento para los tres métodos	82
5.3. Resultados numéricos	87
6. Conclusiones	101
A. Apéndice	103

Capítulo 1

Introducción

En el área de dinámica molecular se ha desarrollado un aparato teórico para modelar las diferentes interacciones que hay entre las partículas que constituyen estructuras elementales de la bioquímica. En particular, se ha puesto especial atención en el estudio de las proteínas debido a la diversas funciones que estas realizan en los seres vivos. Algunos trabajos relacionados se pueden encontrar en [1],[2],[3]. Estos modelos toman en cuenta interacciones debidas a cambios conformacionales como pueden ser torsiones y cambios en los ángulos diedrales, también interacciones debidas a los enlaces químicos y las debidas a las fuerzas de Van der Waals (Lennard–Jones) [4]. Sin embargo, aunque han tenido mucho éxito con su implementación desde los años 70, requieren un conjunto amplio de parámetros libres que se ajustan con evidencia experimental, y que tienen que ser modificados dependiendo del fenómeno y la escala que se quiere describir. Adicionalmente, al incorporar diferentes tipos de interacciones, utilizan una cantidad exhaustiva de recursos computacionales para su descripción evolutiva.

En los años 90, M. Tirion y D. ben-Avraham propusieron un modelo simplificado fenomenológico para las interacciones entre átomos que constituyen las proteínas [5],[6],[7], en el cual se considera que existe una interacción lineal de tipo elástico entre partículas. Esta nueva descripción es referida en la literatura como modelos de redes elásticas. A diferencia de los modelos de dinámica molecular, en esta nueva descripción solo fija un único parámetro denominado radio de corte, que modula el alcance de la interacción. De esta manera, si un par de partículas distan menos que este radio crítico, entonces están conectadas con un potencial de Hooke, y no lo están en caso contrario. A pesar de la simplificación del modelo, se logró describir numéricamente la función de densidad de los modos de vibración para las bajas frecuencias. Esta idea la presentan más tarde, S. Nicolay y Y.-H. Sanejouand [8], donde muestran que la dinámica asociada a modos con longitud de onda larga, esta dominada por un conjunto robusto de modos normales. En un trabajo posterior, Juanico, Sanejouand, Piazza, y De los Rios [9] incluyen efectos no lineales al considerar en la energía potencial términos con energía elástica de cuarto orden. El objetivo de esto, es explicar la localización de la energía en las regiones más rígidas de la proteína, que además se consideran las de mayor actividad química.

La idea propuesta por Juanico et al [10], es encontrar numéricamente órbitas periódicas de gran amplitud [11], [12]. Ellos argumentan que estas órbitas corresponden a oscilaciones espacialmente localizadas y de una frecuencia alta en comparación con las frecuencias de modos normales. Los autores sugieren que la localización se debe a los términos no lineales. El análisis de [10] sugiere también varios problemas matemáticos interesantes relacionados a la existencia de órbitas periódicas, y obtienen algunos resultados

de localización, sin embargo, el efecto de la inhomogeneidad espacial, la no linealidad y el mecanismo de localización no quedan suficientemente claros.

El enfoque de esta tesis, es tratar de conectar los efectos de localización en las redes elásticas que describen un modelo simplificado de proteína con fenómenos de localización en cadenas lineales inhomogéneas. La inhomogeneidad corresponde a regiones de una red que puede ser tridimensional con mayor densidad de átomos en cierta región, y por lo tanto, mayor número de interacciones entre átomos cercanos dentro de la misma región. La hipótesis es que las redes elásticas que describen estos arreglos de partículas tienen modos normales localizados espacialmente y algunos persisten en el sistema no lineal. La tesis se dedica principalmente a la aproximación de modos normales débilmente no lineales, que estando cerca de modos lineales espacialmente localizados son también localizados. Además se trata de explicar los fenómenos de localización lineal y débilmente no lineal considerando redes elásticas más generales. Esto permite describir un mecanismo para la persistencia de localización lineal y no lineal en diferentes redes elásticas, que incluyen modelos tridimensionales. Uno de los resultados de particular importancia es que la localización espacial de modos de vibración es un fenómeno robusto.

Este trabajo está compuesto de cuatro partes principales ordenadas como capítulos. En el capítulo 2 se presenta el modelo de interacción entre masas puntuales (átomos) [9] de tipo red elástica que incorpora términos cuadráticos y términos no lineales (cuárticos). El modelo tiene la característica de que las interacciones entre partículas ocurren dentro de un radio de interacción definido de manera prescrita. Utilizando una hipótesis de “pequeñas vibraciones” o de “pequeñas deformaciones” (que se hace más precisa en el texto), se propone una simplificación del modelo original a un modelo tipo Fermi-Pasta-Ulam (FPU) cuártico, en el cual, el número de interacciones de cada masa puntual es variable. Este tipo de cadenas FPU-inhomogénea no parece haber sido estudiada en la literatura. El modelo original y la aproximación tipo FPU son sistemas Hamiltonianos, con variables de posición que describen el desplazamiento relativo de cada masa respecto a su posición de equilibrio. La información sobre que partículas están conectadas entre sí se codifica en una matriz denominada matriz de conectividad, que determina las frecuencias lineales del sistema y la forma en que se distribuyen sobre el espacio los modos normales. El cambio a las variables de modos normales se hace conservando la estructura Hamiltoniana del sistema.

En el capítulo 3, se hace un estudio de valores y de vectores propios de la matriz de conectividad, para diferentes ejemplos de redes elásticas en una, dos y tres dimensiones espaciales. En este estudio solo se considera la parte lineal. Las redes tridimensionales que se estudian en más detalle son las que corresponden a las estructuras de los catalizadores proteínicos Ribosima y Subtilisina, obtenidas de datos cristalográficos [13], [14].

Se comienza con el análisis de configuraciones unidimensionales donde la distribución de las partículas es homogénea, excepto en un conjunto de regiones, sobre las cuales, de manera artificial se aglomeran más partículas. Al hacer numéricamente el análisis espectral a la matriz de conectividad de estas cadenas, se encuentra que los modos altos de vibración se localizan espacialmente sobre las regiones de aglomeración. Este comportamiento también lo presentan estructuras tridimensionales tales como la Ribosima y Subtilisina. En algunos casos unidimensionales se observa la aparición de una banda de separación (gap) entre las frecuencias de los modos localizados y los modos extendidos espacialmente, también se observa que el traslape (intercambio de energía) entre modos localizados en diferentes regiones de la cadena puede ser muy pequeño. Este fenómeno es muy importante en este estudio, ya que está relacionado con la existencia de una variedad invariante constituida por los modos altos de oscilación.

En el capítulo 4 se utiliza la teoría de formas normales de Birkhoff para eliminar un conjunto de términos no resonantes de la parte cuártica del Hamiltoniano, mediante cambios de variable simplécticos cercanos a la identidad. El objetivo en esta parte es encontrar la forma normal parcial, la cual es una aproximación del sistema Hamiltoniano original. Las condiciones de no resonancia son fundamentales de considerar y se basan en observaciones numéricas para diferentes ejemplos de cadenas del capítulo 3. Primero se estudia el caso donde los modos localizados con frecuencias altas separadas del resto por un gap, para estos casos, la condición de no resonancia usa solo información sobre las frecuencias de los modos normales. Este argumento se generaliza a cadenas que no presentan gap en el espectro, de tal manera, que utilizando la información de la superposición (traslape espacial) de los modos normales, es posible hacer una separación del espectro en conjuntos de modos con baja interacción entre sí. Este procedimiento se aplica también a los casos en tres dimensiones espaciales como son la Ribosima y la Subtilisina.

La construcción de la forma normal incluye un segundo paso, con el cual, utilizando información sobre las frecuencias, se eliminan más términos cuárticos del Hamiltoniano, restringido al subespacio invariante de los modos altos de vibración. El resultado es que el sistema que describe las ecuaciones en el subespacio invariante de modos localizados presenta una nueva cantidad conservada, que denotamos como potencia, y que es el resultado de la simetría del Hamiltoniano ante cambios de fase global. Fijando el valor de esta cantidad se deduce la existencia de órbitas periódicas en el subespacio invariante a través de un argumento topológico. Estas órbitas periódicas son de tipo “breather”, i.e. equilibrios relativos de la simetrías globales, y corresponden a puntos críticos de la energía en la hiperesfera de potencia constante. Además, se garantiza la existencia un número mínimo de órbitas periódicas. Las órbitas periódicas tipo breather de energía máxima y mínima se calculan numéricamente utilizando el método del gradiente (ascenso/descenso mas pronunciado) restringido a la hiperesfera de potencia constante. También, se presenta un análisis preliminar de estabilidad lineal para estas órbitas periódicas en el subespacio invariante.

Es notorio que la existencia de órbitas periódicas en la vecindad del origen para sistemas de osciladores acoplados (con energía definida cerca del origen) se sigue del teorema de Weinstein-Moser [15], [16], que utiliza métodos del cálculo de variaciones y topológicos. Algunos resultados relacionados mas generales se encuentran en [17]. Sin embargo, estos teoremas de existencia no permiten en general ubicar las órbitas en el espacio fase. En comparación, los métodos perturbativos para la existencia de órbitas periódicas pueden ser constructivos. Esto se resume en el teorema de Poincaré que ofrece un criterio para la continuación de órbitas periódicas en términos del espectro de Floquet alrededor de la órbita periódica, (véase [18] para el caso general y el caso Hamiltoniano, y para los casos con simetrías adicionales véase [19], [20]). Una aplicación de esta teoría a sistemas de osciladores es el teorema clásico de Lyapunov [18]. La tesis que aquí se presenta usa el argumento de formas normales para buscar las órbitas periódicas en subespacios invariantes con frecuencias muy cercanas, una idea parecida esta en [21], [22]. Un aspecto relevante del presente trabajo es el uso de la simetría adicional, dentro del subespacio invariante. La propiedad de localización espacial se basa en información numérica del análisis espectral de la matriz de conectividad como se indica en el capítulo 3. Sin embargo, es plausible que la localización de los modos normales pueda ser abordada de manera rigurosa en el futuro para algunas configuraciones.

La simetría ante cambios de fase global permite aplicar un argumento variacional topológico para la existencia de equilibrios relativos sin usar métodos de cálculo de variaciones. Esta simetría esta presente también en cadenas tipo Schrödinger no lineales, y tiene aplicaciones en varios problemas relacionados a órbitas periódicas [23], [24], [25], [26]. El uso de la simetría evita el argumento de continuación del teorema de Lyapunov que falla en el caso de resonancia. La ubicación de la órbita no es precisa (i.e. se tiene que calcular numéricamente) pero la localización espacial esta garantizada por el análisis lineal. El

cálculo numérico de la órbita periódica que se obtiene con este método permitiría un estudio numérico del espectro de Floquet alrededor de la órbita periódica de la forma normal. Este cálculo numérico, junto con estimaciones del tamaño del error de la forma normal, ver e.g. [27], podrían ser usados para mostrar la existencia de estas órbitas de forma rigurosa en cadenas especiales. Otra posible extensión sería usar las órbitas periódicas calculadas aquí como primeras aproximaciones para métodos de continuación numérica, como los que se implementan en AUTO, véase e.g. [28]. La posibilidad de continuar las órbitas periódicas localizadas que se encuentran cerca del origen permitiría también conectar este trabajo con los resultados de Piazza y Sanejouand [10] sobre órbitas de gran amplitud.

Respecto al uso de las formas normales de Birkhoff, se hace notar que es posible estimar el radio de convergencia de la forma normal [27], [29], [30]. En el caso de cadenas tipo FPU, las estimaciones están basadas en un estudio más detallado del tamaño de los coeficientes de interacción entre los modos normales. Estos coeficientes se han calculado explícitamente para el caso del modelo FPU clásico (cadena unidimensional con vecinos próximos) en [31]. En [32] se estudia también la eliminación de los términos cúbicos, y la integrabilidad de la parte cuártica resonante. Esta propiedad es relevante al problema clásico de recurrencia en la cadena FPU [33], [34], en donde varios autores han tratado de justificar y generalizar la explicación heurística de este fenómeno por la integrabilidad de la ecuación KdV [35], [36]. Esta conexión de los fenómenos de recurrencia en cadenas FPU con la teoría KAM se discute en [37]. Otros estudios de recurrencia se han enfocado en los modos normales no lineales de frecuencia baja [38]. El estudio de estos problemas en cadenas inhomogéneas no se ha hecho.

En el capítulo 5 se hace un estudio numérico mediante tres métodos de integración, Runge Kutta 4, Störmer-Verlet y un método simpléctico denominado PEFRL (Position Extended Forest-Ruth Like) [39]. Dando los mejores resultados (en cuanto a conservación de la energía) el simpléctico. Se integran un conjunto de diferentes configuraciones, tanto unidimensionales como en dos y tres dimensiones, se utilizan para cada red de partículas, cuatro condiciones iniciales en el espacio de los modos y se compara gráficamente como es el resultado después de integrar un tiempo que corresponde a un múltiplo del período máximo para cada configuración. También se presentan las gráficas para la evolución de la energía sobre el espacio de los modos. Existen varios resultados, el primero es que las órbitas periódicas encontradas con el método del descenso/ascenso para la forma normal, en general, no persisten en el sistema completo. Sin embargo, un porcentaje relevante de la energía permanece en la región espectral de las condiciones iniciales. Lo anterior se observa para diferentes configuraciones, aunque algunas logran retener la energía en la parte alta del espectro. Otra de las observaciones esta relacionada con la permanencia de la energía en las regiones bajas del espectro, cuando la condición inicial esta en esa región.

Capítulo 2

Modelo de Red Elástica no Lineal

El modelo con el que comienza este trabajo esta basado en el propuesto por B. Juanico et al [9], que tiene la propiedad de tomar en cuenta interacciones de mayor alcance entre partículas, lo cual se traduce en mayor número de conexiones a la red elástica, esto ocurre por que se incorpora la interacción con un número arbitrario de partículas, que sólo depende del radio de corte, lo que permite al modelo posibilidades dinámicas que nos son tomadas en cuenta por modelos de interacción con primeros vecinos. El sistema consiste de N partículas en un espacio \mathbb{R}^D , donde D representa el número de dimensiones. Las coordenadas para las posiciones de equilibrio de las partículas que conforman la cadena son denotadas por \mathbf{R}_i , donde el subíndice i indica la i -ésima partícula. La interacción entre la partícula i y la j , $\{i, j = 1, \dots, N\}$ esta determinada por la condición $|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| \leq R_c$. Donde $|\cdot|$ representa la norma Euclideana en \mathbb{R}^D , con $R_c \in \mathbb{R}$ un radio crítico de interacción o de corte entre partículas.

Las partículas que componen la cadena, oscilan alrededor de las posiciones de equilibrio \mathbf{R}_i . La posición de cada partícula i en la evolución temporal del sistema, es descrita con las variables \mathbf{r}_i . Como una simplificación de la descripción geométrica del sistema, se definen las variables \mathbf{q}_i como las variables de posición relativa.

$$\mathbf{q}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i. \quad (2.1)$$

Esto introduce una descripción de la dinámica de la red en términos de las posiciones relativas de una partícula con sus vecinas. En la Figura 2.1 se muestra un esquema de la relación entre las diversas variables involucradas en la descripción de la red de partículas. Se introduce también la notación para la diferencia entre las posiciones de equilibrio de la partícula i con la j . En particular se hacen las definiciones de las relaciones siguientes.

$$\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j. \quad (2.3)$$

Para la dinámica de las partículas se define la matriz de interacción c_{ij} la cual contiene la información sobre interacciones entre partículas dado un radio crítico R_c , en la Figura 2.1 se muestra un esquema de la interacción entre pares de partículas.

$$c_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{R}_{ij} \leq \mathbf{R}_c, \\ 0 & \text{si } \mathbf{R}_{ij} > \mathbf{R}_c. \end{cases} \quad (2.4)$$

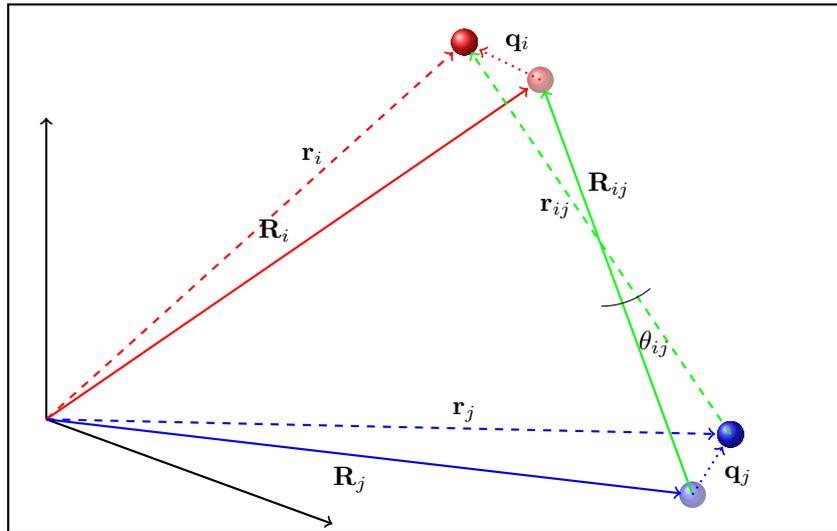


Figura 2.1: Esquema que ilustra la relación entre las variables que describen la cadena, las variables \mathbf{R}_i y \mathbf{R}_j son las posiciones de equilibrio de las partículas i y j respecto al sistema de referencia, para las partículas i y j . Las variables \mathbf{r}_i y \mathbf{r}_j son las posiciones de las partículas i y j respectivamente. Las variables \mathbf{q}_i y \mathbf{q}_j son la diferencia entre posiciones de equilibrio y las posiciones como se indica en la ecuación (2.1).

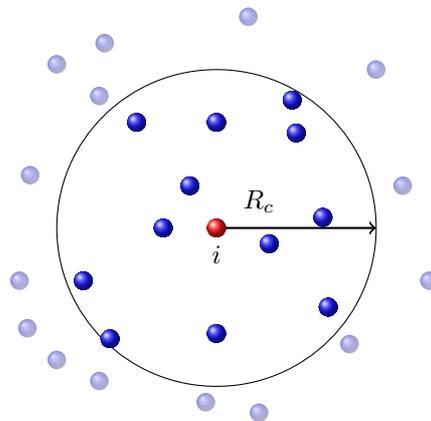


Figura 2.2: Esquema de interacción de la partícula i al centro con sus partículas vecinas dentro de una esfera de radio R_c .

La manera de expresar la energía potencial U almacenada en la red, es en términos de la norma de la diferencia de la posición de pares de partículas $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ comparada contra las posiciones de equilibrio $|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|$ como se indica a continuación.

$$U = \sum_{i,j=1} c_{ij} \left[\frac{k_2}{2} (|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| - |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|)^2 + \frac{k_4}{4} (|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| - |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|)^4 \right]. \quad (2.5)$$

Cada par de partículas contribuye con una componente cuadrática y una cuártica. Las constantes k_2 y k_4 modulan la componente cuadrática y la cuártica respectivamente. Se puede notar que estas constantes no dependen de los índices i, j , es decir las interacciones están reguladas con las mismas constantes para todo par de partículas i, j . Utilizando la relación para las variables relativas \mathbf{q}_i (2.1) y las definiciones (2.2) y (2.3), la ecuación anterior se puede expresar como

$$\begin{aligned} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| - |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| &= |\mathbf{q}_i + \mathbf{R}_i - \mathbf{q}_j - \mathbf{R}_j| - |\mathbf{R}_{ij}|, \\ &= |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| - |\mathbf{R}_{ij}|, \\ &= |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Sustituyendo (2.6) en la ecuación (2.5) para el potencial

$$U = \sum_{i,j=1} c_{ij} \left[\frac{k_2}{2} (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^2 + \frac{k_4}{4} (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^4 \right], \quad (2.7)$$

Por lo tanto la energía potencial queda ahora expresada como una función de las variables relativas. También se hace referencia a las diferencias entre las posiciones de equilibrio, sin embargo, mas adelante se darán argumentos para hacer eliminar esta referencia y solo tomar en cuenta deformaciones relativas.

Para hacer una simplificación del modelo utilizamos lo siguiente:

Proposición 1. Sea $D = 1$ y supóngase que $|\mathbf{R}_i| > |\mathbf{R}_j| \Rightarrow |\mathbf{r}_i| > |\mathbf{r}_j| \forall t$. Entonces

$$\begin{aligned} (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^2 &= |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2, \\ (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^4 &= |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^4. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Demostración 1. Partiendo de la hipótesis anterior se tiene:

$$|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}| = |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)| - |\mathbf{R}_{ij}|,$$

para lo anterior se utilizó $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$ y $|\mathbf{R}_{ij}| > 0$, por lo tanto, $|\mathbf{R}_{ij}| = \mathbf{R}_{ij}$. Para la siguiente parte se utiliza $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j > 0$, entonces

$$|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| - \mathbf{R}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j - \mathbf{R}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j - \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_j = \mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j,$$

por lo tanto se tiene

$$\begin{aligned} (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^2 &= |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2, \\ (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^4 &= |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^4. \end{aligned}$$

□

Proposición 2. Sea $D \geq 2$, entonces

$$(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^2 = |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2 + O(h^2). \quad (2.9)$$

donde θ_{ij} es el ángulo entre los vectores \mathbf{R}_{ij} y $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ y

$$h = \max\{\theta_{ij}, |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \mid \forall i, j = 1 \dots N\}. \quad (2.10)$$

Demostración 2. Usando $\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}$, se tiene:

$$(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^2 = |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}|^2 - 2 \frac{(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}) \cdot \mathbf{R}_{ij}}{\cos \theta_{ij}} + |\mathbf{R}_{ij}|^2, \quad (2.11)$$

$$= (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}) \cdot (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}) - 2 \frac{(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}) \cdot \mathbf{R}_{ij}}{\cos \theta_{ij}} + |\mathbf{R}_{ij}|^2,$$

$$= \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{q}_i - \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{q}_j + \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{R}_{ij} - \mathbf{q}_j \cdot \mathbf{q}_i + \mathbf{q}_j \cdot \mathbf{q}_j - \mathbf{q}_j \cdot \mathbf{R}_{ij} + \mathbf{R}_{ij} \cdot \mathbf{q}_i - \mathbf{R}_{ij} \cdot \mathbf{q}_j$$

$$+ \mathbf{R}_{ij} \cdot \mathbf{R}_{ij} - 2 \frac{(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}) \cdot \mathbf{R}_{ij}}{\cos \theta_{ij}} + |\mathbf{R}_{ij}|^2,$$

$$= |\mathbf{q}_i|^2 + |\mathbf{q}_j|^2 - 2\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{q}_j + 2\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{R}_{ij} - 2\mathbf{q}_j \cdot \mathbf{R}_{ij} + |\mathbf{R}_{ij}|^2$$

$$- 2(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}) \cdot \mathbf{R}_{ij} \sec \theta_{ij} + |\mathbf{R}_{ij}|^2. \quad (2.12)$$

Usando la identidad

$$\sec \theta_{ij} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{2n} E_{2n} \theta_{ij}^{2n}}{(2n)!}, \quad (2.13)$$

donde E_{2n} son los llamados números de Euler, $E_{2n} = \{1, -1, 5, -61, 1385, -50521, \dots\}$ para $|\theta_{ij}| \leq \frac{\pi}{2}$, es posible utilizar la aproximación $\sec \theta_{ij} = 1 + O(h^2)$. Con lo cual la ecuación (2.12) queda aproximada por la ecuación (2.14).

$$(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^2 = |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2 + 2\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{R}_{ij} - 2\mathbf{q}_j \cdot \mathbf{R}_{ij} + |\mathbf{R}_{ij}|^2$$

$$- 2\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{R}_{ij} + 2\mathbf{q}_j \cdot \mathbf{R}_{ij} - 2|\mathbf{R}_{ij}|^2 + |\mathbf{R}_{ij}|^2 + O(h^2), \quad (2.14)$$

tomando la ecuación (2.12) se iguala al resultado expresado en la ecuación (2.14) lo cual concluye la demostración de (2.9). □

Una observación adicional interesante de la aproximación es su interpretación desde el punto de vista geométrico, y está relacionada con el hecho de que en el nuevo sistema de coordenadas \mathbf{q}_i $i = 1 \dots N$, la energía potencial U de la ecuación (2.7), ya no aparecen las referencias a las posiciones de equilibrio \mathbf{R}_{ij} , lo cual elimina la dependencia respecto al marco de referencia, es decir, se tiene un sistema de coordenadas donde la energía potencial U depende exclusivamente de las diferencia relativas entre las partículas que componen la red, y no del marco de referencia. Esto introduce una invarianza de la red ante movimientos de cuerpo rígido, es decir, traslaciones y rotaciones. En la siguiente proposición estimamos los términos cuárticos del potencial.

Proposición 3. Sea $D \geq 2$, entonces

$$(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^4 = |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^4 + O(h^2). \quad (2.15)$$

Demostración 3. Para el caso de los términos cuárticos de la ecuación (2.7) para el potencial y de la proposición anterior, se tiene:

$$\begin{aligned} (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^4 &= (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^2 (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| + |\mathbf{R}_{ij}|)^2, \\ &= (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2 + O(h^2)) (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2 + O(h^2)), = |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^4 + 2|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2 O(h^2) + O(h^4), \end{aligned}$$

por lo tanto

$$(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^4 = |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^4 + O(h^2).$$

□

Finalmente con los resultados de las proposiciones 2 y 3 se tiene una expresión para la energía potencial en términos de las variables relativas, como se indica a continuación.

$$U = \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \left[\frac{k_2}{2} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2 + \frac{k_4}{4} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^4 \right] + O(h^2). \quad (2.16)$$

La energía cinética T , se calcula para cada partícula y se suma sobre todas las partículas de la red

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} |\mathbf{p}_i|^2, \quad (2.17)$$

donde \mathbf{p}_i representa el momento lineal de la partícula i , y m la masa. El modelo utiliza la misma masa para cada partícula. De este modo, se pueden expresar tanto el Lagrangiano \mathcal{L} , como el Hamiltoniano \mathcal{H} en la ecuación (2.18).

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m |\dot{\mathbf{q}}_i|^2 - \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \left[\frac{k_2}{2} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2 + \frac{k_4}{4} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^4 \right], \\ \mathcal{H} &= \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N |\mathbf{p}_i|^2 + \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \left[\frac{k_2}{2} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2 + \frac{k_4}{4} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^4 \right]. \end{aligned} \quad (2.18)$$

En este trabajo en particular se utiliza la descripción Hamiltoniana. El sistema (2.18) tiene semejanza con el modelo β FPU (cuártico) [33] para el caso con dimensión $D = 1$. La ecuación considera términos de cuarto orden en el potencial, pero con la diferencia de que al variar el parámetro de interacción R_c se pueden incorporar más interacciones por partícula.

El análisis anterior esta hecho para una energía potencial donde todos los términos son cuadráticos o cuárticos, sin embargo, se puede hacer un análisis semejante para un modelo que incluye términos cúbicos, como sigue:

Proposición 4. Sea $D = 1$. Entonces

$$(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^3 = \text{sign}(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^3.$$

Demostración 4. Se sigue inmediatamente de la demostración de la proposición 1.

□

Proposición 5. Sea $D \geq 2$. Entonces

$$(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^3 = \text{sign}(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^3 + O(h^2)).$$

Demostración 5. Haciendo la descomposición

$$\begin{aligned} (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^3 &= (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^2 (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|) \\ &= (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2 + O(h^2))(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|), \end{aligned}$$

por otra parte

$$\begin{aligned} (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|) &= \text{sign}(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|) \sqrt{(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)^2} \\ &= \text{sign}(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j + \mathbf{R}_{ij}| - |\mathbf{R}_{ij}|)(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j| + O(h^2)). \end{aligned}$$

□

2.1. Análisis de conectividad y modos normales del modelo FPU cuártico

En esta sección se hace un análisis del modelo Hamiltoniano representado en la ecuación (2.18). Para ello se determina el espacio de vectores propios del problema lineal y se hace una transformación a estas coordenadas donde se incluyen los términos no lineales. Después se continua el análisis en variables espectrales que permiten ver el tipo de interacciones entre los diferentes modos de vibración. Este proceso es descrito con detalle a continuación.

La primera etapa es separar las componentes de la energía elástica de la red (2.18), de acuerdo al orden, como se muestra en las ecuaciones siguientes y se introducen las definiciones 1 y 2.

$$U_2 = \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_2}{2} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2, \quad (2.19)$$

$$U_4 = \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_4}{4} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^4. \quad (2.20)$$

2.1.1. Representación en variables desacopladas para el problema lineal

Definición 1. \mathbf{p} es el vector formado por las componentes del momento $p_{i,d}$, donde los subíndices representan la componente d de la partícula i , con $i \in \{1, \dots, N\}$ y $d \in \{1, \dots, D\}$. De tal manera que el vector $\mathbf{p} = (p_{1,1}, \dots, p_{N,1}, p_{1,2}, \dots, p_{N,2}, \dots, p_{N,D})$, con D el número de dimensiones.

Definición 2. \mathbf{q} es el vector formado por las componentes de la posición $q_{i,d}$, donde los subíndices representan la componente d de la partícula i , con $i \in \{1, \dots, N\}$ y $d \in \{1, \dots, D\}$. De tal manera que el vector $\mathbf{q} = (q_{1,1}, \dots, q_{N,1}, q_{1,2}, \dots, q_{N,2}, \dots, q_{N,D})$, con D el número de dimensiones.

Recordando las definiciones de producto interno para un espacio Euclidean: Sean los vectores $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{ND}$ y la matriz $A \in \mathbb{R}^{ND} \times \mathbb{R}^{ND}$ entonces el producto interno está definido de la manera usual.

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \sum_{n_1, n_2=1}^{ND} x_{n_1} y_{n_2}, \quad (2.21)$$

claramente, la energía cinética (2.17) tiene la forma de un producto interno,

$$T = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N |\mathbf{p}_i|^2 = \frac{1}{2m} \langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle. \quad (2.22)$$

Definición 3. La matriz C denominada matriz de conectividad, se define en relación con la matriz c , la cual llamamos matriz de contacto y fue definida en la ecuación (2.4), la matriz $n \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$ esta definida como (2.24), los elementos n_i de esta matriz diagonal se determinan con la ecuación (2.23) y representan el número de partículas con las que esta conectada la partícula i con $i = 1 \dots N$.

$$n_i = \sum_{j=1}^N c_{ij} \quad (2.23)$$

$$n = \begin{pmatrix} n_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & n_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & n_{N-1} & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & n_N \end{pmatrix}, \quad c = \begin{pmatrix} 0 & c_{12} & \cdots & c_{1N} \\ c_{21} & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & 0 & c_{N-1N} \\ c_{N1} & \cdots & c_{NN-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

$$C = -c + n. \quad (2.25)$$

Definición 4. C_D es una matriz con D bloques sobre la diagonal. Cada bloque es la matriz C , de esta forma $C_D \in \mathbb{R}^{ND} \times \mathbb{R}^{ND}$,

$$C = \begin{pmatrix} n_1 & -c_{12} & \cdots & -c_{1N} \\ -c_{21} & n_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & -c_{N-1N-1} & -c_{N-1N} \\ -c_{N1} & \cdots & -c_{NN-1} & n_N \end{pmatrix}, \quad C_D = \begin{pmatrix} C & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & C & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & C & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & C \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

Proposición 6. La energía potencial U_2 de la ecuación (2.19) se puede expresar como una forma bilineal cuadrática, en términos del vector \mathbf{q} (definición 2) y de la matriz de conectividad multidimensional dada en la ecuación (2.26),

$$U_2 = \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_2}{2} |(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)|^2 = k_2 \langle \mathbf{q}, C_D \mathbf{q} \rangle. \quad (2.27)$$

Demostración 6. Para hacer más sencillos los cálculos se desarrollan los vectores \mathbf{q}_i usando su definición como se indica a continuación.

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_2}{2} |(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)|^2 &= \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_2}{2} |(q_{i,1}, \dots, q_{i,D}) - (q_{j,1}, \dots, q_{j,D})|^2 \\ &= \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_2}{2} ((q_{i,1} - q_{j,1})^2 + (q_{i,2} - q_{j,2})^2 + \dots + (q_{i,D} - q_{j,D})^2), \end{aligned} \quad (2.28)$$

simplificando:

$$\begin{aligned} \frac{k_2}{2} \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \left(\sum_{d=1}^D (q_{i,d} - q_{j,d})^2 \right) &= \frac{k_2}{2} \sum_{d=1}^D \sum_{i,j=1}^N c_{ij} (q_{i,d} - q_{j,d})^2 \\ &= \frac{k_2}{2} \sum_{d=1}^D \sum_{i,j=1}^N c_{ij} (q_{i,d}^2 + q_{j,d}^2 - 2q_{i,d}q_{j,d}) = \frac{k_2}{2} \sum_{d=1}^D \sum_{i,j=1}^N c_{ij} (q_{i,d}\delta_{ij}q_{j,d} + q_{i,d}\delta_{ij}q_{j,d} - 2q_{i,d}q_{j,d}) \\ &= k_2 \sum_{d=1}^D \sum_{i,j=1}^N c_{ij} (q_{i,d}\delta_{ij}q_{j,d} - q_{i,d}q_{j,d}) = k_2 \sum_{d=1}^D \sum_{i,j=1}^N (-q_{i,d}q_{j,d}c_{ij} + q_{i,d}\delta_{ij}c_{ij}q_{j,d}). \end{aligned} \quad (2.29)$$

La matriz c_{ij} es la misma para todas las dimensiones d , por esta razón no se etiqueta con el subíndice d . Adicionalmente, se revisa que se cumple $q_{i,d}\delta_{ij}c_{ij}q_{j,d} = q_{i,d}n_iq_{j,d}$, donde n_i es el valor que toma la diagonal de c_{ij} (2.25). Por lo tanto:

$$\begin{aligned} k_2 \sum_{d=1}^D \sum_{i,j=1}^N (-q_{i,d}c_{ij}q_{j,d} + q_{i,d}n_iq_{j,d}) &= k_2 \sum_{d=1}^D \sum_{i,j=1}^N (q_{i,d}C_{ij}q_{j,d}), \\ U_2 = \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_2}{2} |(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)|^2 &= k_2 \sum_d \sum_{i,j=1}^N (q_{i,d}C_{ij}q_{j,d}) = k_2 \langle \mathbf{q}, C_D \mathbf{q} \rangle. \end{aligned} \quad (2.30)$$

□

Observación 1. Con los resultados de las proposiciones 1, 3 y 6 se puede expresar la parte cuadrática del *Hamiltoniano* \mathcal{H}_2 como

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N |\mathbf{p}_i|^2 + \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_2}{2} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2 = \frac{1}{2m} \langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle + k_2 \langle \mathbf{q}, C_D \mathbf{q} \rangle. \quad (2.31)$$

Observación 2. \mathcal{H}_2 puede simplificarse llevando la ecuación (2.27) a su forma ortogonal. La matriz C es *simétrica*, entonces puede expresarse en términos de una matriz diagonal.

$$C = M^{-1}\Lambda M \Rightarrow \Lambda = MCM^{-1}. \quad (2.32)$$

Donde la matriz M satisface $M^T = M^{-1}$, es una matriz *ortogonal*. Las columnas de la matriz M son los vectores propios de C . La *simetría* de la matriz C es consecuencia de que la interacción de la partícula i con la j es la misma que la interacción de la partícula j con la i .

La matriz Λ es la matriz diagonal formada por los valores propios λ_i , $i = 1 \dots N$ de la matriz C . Además, como las interacciones entre partículas están determinadas por cantidades no negativas, la matriz C es no negativa, por lo tanto sus valores propios λ_i son no negativos y satisfacen, $\lambda_1 < \lambda_2 \dots \lambda_N$ [40]. La matriz C_D es D veces la matriz C arreglada en bloques sobre la diagonal, por lo tanto se puede repetir D veces el mismo procedimiento, uno por cada dimensión, teniendo así las relaciones:

$$C_D = M_D^{-1}\Lambda_D M_D \Rightarrow \Lambda_D = M_D C_D M_D^{-1}. \quad (2.33)$$

Definición 5. La matriz M_D define la transformación a un conjunto de coordenadas representadas por \mathbf{Q} y \mathbf{P} que se obtienen con las relaciones de (2.34) y (2.35) respectivamente.

$$\mathbf{Q} = M_D \mathbf{q}, \quad (2.34)$$

$$\mathbf{P} = (M_D^T)^{-1} \mathbf{p}, \quad (2.35)$$

con el cambio de base anterior se tiene $\mathbf{P} = (P_{11}, \dots, P_{N_D})$, análogamente para $\mathbf{Q} = (Q_{11}, \dots, Q_{N_D})$.

Proposición 7. El cambio de variables determinado por las ecuaciones (2.34) y (2.35) es *Simplético*, es decir, se satisface la relación.

$$[Df]^T \mathbb{J} [Df] = \mathbb{J}, \quad (2.36)$$

donde \mathbb{J} es la matriz *simplética*

$$\mathbb{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (2.37)$$

y $[Df]$ es la transformación (2.38) [41],

$$[Df] \begin{bmatrix} \vec{q} \\ \vec{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_D & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (M_D^T)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{q} \\ \vec{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{Q} \\ \vec{P} \end{bmatrix}. \quad (2.38)$$

Demostración 7. Un primer aspecto que hay que notar es que como C_D es *ortogonal* entonces se satisface:

$$M_D^T = M_D^{-1} \Rightarrow M_D = (M_D^T)^{-1},$$

la transformación esta dada por (2.39).

$$[Df] = \begin{bmatrix} M_D & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & M_D \end{bmatrix}, \quad [Df]^T = \begin{bmatrix} M_D^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & M_D^T \end{bmatrix}, \quad (2.39)$$

por lo tanto la condición de simplecticidad $[Df]^T \mathbb{J} [Df] = \mathbb{J}$ se expresa como:

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} M_D^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & M_D^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_D & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & M_D \end{bmatrix}, \\
& = \begin{bmatrix} M_D^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & M_D^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & M_D \\ -M_D & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \\
& = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & M_D^T M_D \\ -M_D^T M_D & \mathbf{0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix} = \mathbb{J}.
\end{aligned}$$

Con lo cual se concluye que el cambio a coordenadas \mathbf{Q} y \mathbf{P} definido por (2.34) y (2.35) es simpléctico. □

Proposición 8. La parte cuadrática del *Hamiltoniano* \mathcal{H}_2 se puede expresar en coordenadas \mathbf{Q} y \mathbf{P} dadas en (2.34) y (2.35) en la forma

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2m} \langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle + k_2 \langle \mathbf{Q}, \Lambda_D \mathbf{Q} \rangle, \quad (2.40)$$

Demostración 8. Partiendo de la ecuación (2.31) se tiene:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_2 &= \frac{1}{2m} \langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle + k_2 \langle \mathbf{q}, C_D \mathbf{q} \rangle = \frac{1}{2m} \langle M_D^T \mathbf{P}, M_D^T \mathbf{P} \rangle + k_2 \langle M_D^T \mathbf{Q}, C_D M_D^T \mathbf{Q} \rangle, \\
&= \frac{1}{2m} \langle \mathbf{P}, M_D M_D^T \mathbf{P} \rangle + k_2 \langle \mathbf{Q}, M_D C_D M_D^T \mathbf{Q} \rangle,
\end{aligned}$$

utilizando (2.33) se obtiene:

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2m} \langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle + k_2 \langle \mathbf{Q}, \Lambda_D \mathbf{Q} \rangle. \quad (2.41)$$

□

Con el resultado de la proposición 8 se obtiene un sistema Hamiltoniano de variables desacopladas, es decir, el espacio original del problema ha sido transformado a un espacio generado por las funciones propias que son un conjunto ortogonal. Se sabe que en estos espacios existen soluciones, que al ser acotada la energía E_c forman órbitas cerradas y que no existe intercambio de energía entre modos. La pregunta natural es ¿qué ocurre si la parte cuártica del Hamiltoniano se transforma a las variables \mathbf{Q} y \mathbf{P} y se incorpora al sistema?, En este caso, se espera que exista intercambio de energía entre los modos de vibración, entonces, cabe preguntar; ¿existen órbitas cerradas para el sistema completo?. Para responder lo anterior, se requieren un análisis mas detallado como se hace en las subsecciones siguientes y con mayor formalismo en el capítulo 4.

2.1.2. Representación del la parte cuártica del Hamiltoniano en variables \mathbf{Q} y \mathbf{P}

Utilizando los resultados de la subsección 2.1.1 para expresar la parte no lineal del modelo U_4 de la ecuación (2.20) en términos de las variables \mathbf{Q} y \mathbf{P} se tiene:

$$\begin{aligned}
U_4 &= \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_4}{4} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^4 = \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_4}{4} (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2)^2 = \frac{k_4}{4} \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \left(\sum_{d=1}^D (q_{i,d} - q_{j,d})^2 \right)^2, \\
&= \frac{k_4}{4} \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \sum_{d_1=1}^D (q_{i,d_1} - q_{j,d_1})^2 \sum_{d_2=1}^D (q_{i,d_2} - q_{j,d_2})^2, \\
&= \frac{k_4}{4} \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \sum_{d_1,d_2=1}^D (q_{i,d_1} - q_{j,d_1})^2 (q_{i,d_2} - q_{j,d_2})^2,
\end{aligned} \tag{2.42}$$

haciendo el cambio de variables definido en las ecuaciones (2.34) y (2.35), de manera que la expresión (2.42) este en función de las variables $\mathbf{P} = [P_{1,1}, \dots, P_{N,D}]$ y $\mathbf{Q} = [Q_{1,1}, \dots, Q_{N,D}]$, se tiene

$$U_4 = \frac{k_4}{4} \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \sum_{d_1,d_2=1}^D \left(\sum_{l_1=1}^N M_{il_1} Q_{l_1,d_1} - \sum_{l_1=1}^N M_{jl_1} Q_{l_1,d_1} \right)^2 \left(\sum_{l_2=1}^N M_{il_2} Q_{l_2,d_2} - \sum_{l_2=1}^N M_{jl_2} Q_{l_2,d_2} \right)^2, \tag{2.43}$$

desarrollando los productos

$$\begin{aligned}
U_4 &= \frac{k_4}{4} \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \sum_{d_1,d_2=1}^D \left(\sum_{l_1=1}^N M_{il_1} Q_{l_1,d_1} - \sum_{l_1=1}^N M_{jl_1} Q_{l_1,d_1} \right) \left(\sum_{l_2=1}^N M_{il_2} Q_{l_2,d_1} - \sum_{l_2=1}^N M_{jl_2} Q_{l_2,d_1} \right) \\
&\quad \left(\sum_{l_3=1}^N M_{il_3} Q_{l_3,d_2} - \sum_{l_3=1}^N M_{jl_3} Q_{l_3,d_2} \right) \left(\sum_{l_4=1}^N M_{il_4} Q_{l_4,d_2} - \sum_{l_4=1}^N M_{jl_4} Q_{l_4,d_2} \right),
\end{aligned} \tag{2.44}$$

y factorizando los elementos de la forma $Q_{l,d}$ y ordenando los subíndices para considerar todas las posibles combinaciones resultantes de los productos cruzados de las sumas

$$\begin{aligned}
U_4 &= \frac{k_4}{4} \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \sum_{d_1,d_2=1}^D \left(\sum_{l_1=1}^N (M_{il_1} - M_{jl_1}) Q_{l_1,d_1} \right) \left(\sum_{l_2=1}^N (M_{il_2} - M_{jl_2}) Q_{l_2,d_1} \right) \\
&\quad \left(\sum_{l_3=1}^N (M_{il_3} - M_{jl_3}) Q_{l_3,d_2} \right) \left(\sum_{l_4=1}^N (M_{il_4} - M_{jl_4}) Q_{l_4,d_2} \right) \\
&= \frac{k_4}{4} \sum_{d_1,d_2=1}^D \sum_{l_1,l_2,l_3,l_4=1}^N \sum_{i,j=1}^N c_{ij} (M_{il_1} - M_{jl_1}) (M_{il_2} - M_{jl_2}) (M_{il_3} - M_{jl_3}) (M_{il_4} - M_{jl_4}) \\
&\quad Q_{l_1,d_1} Q_{l_2,d_1} Q_{l_3,d_2} Q_{l_4,d_2}.
\end{aligned} \tag{2.45}$$

Definición 6. El factor $\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ con $l_1, l_2, l_3, l_4 = 1, \dots, N$, queda definido como:

$$\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4} = \sum_{i,j=1}^N c_{ij} (M_{il_1} - M_{jl_1}) (M_{il_2} - M_{jl_2}) (M_{il_3} - M_{jl_3}) (M_{il_4} - M_{jl_4}). \tag{2.46}$$

de (2.45) se tiene

$$U_4 = \frac{k_4}{4} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4=1}^N \Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4} Q_{l_1, d_1} Q_{l_2, d_1} Q_{l_3, d_2} Q_{l_4, d_2}. \quad (2.47)$$

finalmente, haciendo la adición de la energía cinética y la potencial dada en (2.41) se tiene el Hamiltoniano cuártico completo en variables \mathbf{Q} y \mathbf{P}

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{1}{2m} \langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle + k_2 \langle \mathbf{Q}, \Lambda_D \mathbf{Q} \rangle + U_4(\mathbf{Q}), \\ &= \frac{1}{2m} \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N P_{l,d}^2 + k_2 \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \lambda_l Q_{l,d}^2 + \frac{k_4}{4} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4=1}^N \Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4} Q_{l_1, d_1} Q_{l_2, d_1} Q_{l_3, d_2} Q_{l_4, d_2}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

En las zonas de aglomeración de partículas el valor de c_{ij} es diferente de cero, si las partículas i y j estan dentro de la región de interacción, lo cual, tiene por consecuencia que haya más contribuciones en los elementos de las sumas que determinan $\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ asociados con esa región de aglomeración.

El factor $\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ tiene la interpretación de factor de “traslape” entre las diferentes funciones propias, es decir, esta relacionado con la transferencia de energía entre diferentes modos de vibración. En el capítulo 4 se presenta un análisis para el balance entre $\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ y las condiciones de resonancia del Hamiltoniano de ejemplos específicos.

2.2. Representación espectral del modelo FPU cuártico

El objetivo principal de esta sección es tener una representación del Hamiltoniano (2.48) en términos de los modos de normales de vibración, los que serán referidos como variables espectrales. Previamente, es necesario simplificar algunos aspectos del modelo, por ejemplo, eliminar las traslaciones de cuerpo rígido que no ejercen influencia en la dinámica interna de la red. También, se normaliza la base de funciones propias con la finalidad de hacer lo más sencilla posible la representación a variables espectrales.

2.2.1. Conservación del momento total

Se puede notar que las traslaciones de cuerpo rígido de la red no ejercen influencia en la dinámica interna de las partículas, esto se puede interpretar como una reducción en la dimensión de los vectores \mathbf{P} y \mathbf{Q} . Sólo resta identificar cual de los componentes de estos vectores son los que permanecen constantes para todo índice $i = 1 \dots N$. Para ello se parte de la relación $C = M \Lambda M^{-1}$, donde M es una matriz ortogonal (esto es, $M M^T = \mathbb{I}$), Λ una matriz diagonal y los elementos de la diagonal son los valores propios y siguen el orden $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_N$. Se tiene que $\lambda_1 = 0$ debido a que es el valor propio que corresponde a traslaciones, y el vector propio correspondiente, es un vector con el valor $1/\sqrt{N}$ en cada entrada. Con estas afirmaciones se plantea la siguiente proposición.

Proposición 9. En el espacio de variables canónicas \mathbf{P} y \mathbf{Q} , es posible reducir un grado de libertad, ya que las traslaciones no participan en la dinámica interna de la red, con lo cual se puede expresar la ecuación (2.48), como se indica en la siguiente expresión

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N P_{l,d}^2 + k_2 \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \lambda_l Q_{l,d}^2 + \frac{k_4}{4} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4=2}^N \Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4} Q_{l_1, d_1} Q_{l_2, d_1} Q_{l_3, d_2} Q_{l_4, d_2}. \quad (2.49)$$

Demostración 9. Mediante las ecuaciones de movimiento para \mathcal{H} de la ecuación (2.48), respecto a $P_{1,d}$ y $Q_{1,d}$ se tiene

$$\dot{Q}_{1,d} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_{1,d}}, \quad (2.50)$$

$$\dot{P}_{1,d} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_{1,d}}, \quad (2.51)$$

por lo tanto

$$\dot{Q}_{1,d} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_{1,d}} = \frac{1}{m} \sum_{d=1}^D P_{1,d} = \frac{1}{m} (P_{1,1} + \dots + P_{1,D}) = \frac{1}{m} \mathcal{P}_1, \quad (2.52)$$

$$\dot{P}_{1,d} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_{1,d}} = 2k_2 \sum_{d=1}^D \lambda_1 Q_{1,d} + \frac{k_4}{4} \frac{\partial}{\partial Q_{1,d}} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4=2}^N \Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4} Q_{l_1, d_1} Q_{l_2, d_1} Q_{l_3, d_2} Q_{l_4, d_2}, \quad (2.53)$$

donde se observa que aparece una primer constante de movimiento \mathcal{P}_1 asociada al momento traslacional de toda la cadena. Por otro lado, es necesario utilizar el hecho de que $\lambda_1 = 0$, por lo que los términos que acompañan este factor en la ecuación (2.53) desaparecen de la ecuación de movimiento.

Solo resta analizar que pasa con el factor $\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}$, cuando alguno de los subíndices $l_i = 1$. Sin pérdida de generalidad se puede utilizar $l_1 = 1$ y recordando la definición (2.46), con lo que se tiene:

$$\Gamma_{1 l_2 l_3 l_4} = \sum_{i, j=1}^N c_{ij} (M_{i1} - M_{j1}) (M_{il_2} - M_{jl_2}) (M_{il_3} - M_{jl_3}) (M_{il_4} - M_{jl_4}), \quad (2.54)$$

pero M_{i1} y $M_{j1} \forall i, j = 1 \dots N$ son el primer vector columna de la matriz M , cuyas entradas son todas iguales a $M_{k1} = 1/\sqrt{N} \forall k \in 1 \dots N$, por lo tanto $(M_{i1} - M_{j1}) = 0$ y consecuentemente $\Gamma_{1 l_2 l_3 l_4} = 0$. El resultado es análogo para l_2, l_3 y l_4 cuando toman el valor de la unidad y con ello se satisface la relación

$$\frac{k_4}{4} \frac{\partial}{\partial Q_{1,d}} \left\{ \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4=2}^N \Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4} Q_{l_1, d_1} Q_{l_2, d_1} Q_{l_3, d_2} Q_{l_4, d_2} \right\} = 0, \quad (2.55)$$

y por lo tanto (recordando que $\lambda_1 = 0$)

$$\dot{P}_{1,d} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_{1,d}} = 2k_2 \sum_{d=1}^D \lambda_1 Q_{1,d} + \frac{k_4}{4} \frac{\partial}{\partial Q_{1,d}} \left\{ \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4=2}^N \Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4} Q_{l_1, d_1} Q_{l_2, d_1} Q_{l_3, d_2} Q_{l_4, d_2} \right\} = 0.$$

Con el resultado de la ecuación (2.52), \mathcal{P}_1 es constante (corresponde con el momento lineal de cuerpo rígido de toda la red), en particular se fija $\mathcal{P}_1 = 0$ (elegimos este marco de referencia), de este modo sólo participan en el Hamiltoniano \mathcal{H} de la ecuación (2.48) los índices $l_1, l_2, l_3, l_4 > 1$, y se puede expresar como

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N P_{l,d}^2 + k_2 \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \lambda_l Q_{l,d}^2 + \frac{k_4}{4} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4=2}^N \Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4} Q_{l_1, d_1} Q_{l_2, d_1} Q_{l_3, d_2} Q_{l_4, d_2}. \quad (2.56)$$

□

La parte del Hamiltoniano correspondiente a \mathcal{H}_2 puede ser transformada mediante un mapeo simpléctico a un conjunto de variables donde aparece explícitamente la frecuencia lineal de oscilación para cada partícula.

Proposición 10. \mathcal{H}_2 Se puede expresar en términos de un conjunto de variables \mathbf{Q}' y \mathbf{P}' a través de una transformación simpléctica en la forma

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_2 &= \frac{1}{2m} \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N P_{l,d}^2 + k_2 \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \lambda_l Q_{l,d}^2, \\ &= \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \frac{1}{2} P_{l,d}'^2 + \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \frac{1}{2} \omega_l^2 Q_{l,d}'^2,\end{aligned}\tag{2.57}$$

donde la relación entre las variables $Q_{l,d}, P_{l,d}$ y $Q_{l,d}', P_{l,d}'$ esta dada por

$$\begin{pmatrix} Q_{l,d}' \\ P_{l,d}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{m} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{m}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_{l,d} \\ P_{l,d} \end{pmatrix},\tag{2.58}$$

y ω_l es la frecuencia lineal

$$\omega_l = \sqrt{2 \frac{k_2 \lambda_l}{m}},\tag{2.59}$$

Demostración 10. Se requiere evaluar la matriz de transformación de (2.58) en la identidad $[Df]^T \mathbb{J} [Df] = \mathbb{J}$, donde \mathbb{J} es la matriz simpléctica (2.36), por lo tanto

$$\begin{aligned}& \begin{pmatrix} \sqrt{m} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{m}} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{m} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{m}} \end{pmatrix}, \\ &= \begin{pmatrix} \sqrt{m} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{m}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{m}} \\ -\sqrt{m} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & 0 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

por lo que satisface la condición de simplecticidad y \mathcal{H}_2 se puede expresar en términos de las variables Q_i' y P_i'

$$\mathcal{H}_2 = \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \frac{1}{2} P_{l,d}'^2 + \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \frac{1}{2} \omega_l^2 Q_{l,d}'^2,\tag{2.60}$$

se puede notar que $\omega_l > 0, \forall l = 2 \dots N$, propiedad heredada de los valores propios λ_l .

□

Observación 3. Estabilidad del origen módulo traslaciones:

Haciendo la definición $\mathbf{z} = (\mathbf{Q}', \mathbf{P}')^T$ se satisface $\mathcal{H}_2(\mathbf{z}) > 0, \forall \mathbf{z} \neq 0$. Entonces $\|\mathbf{z}\|$ esta acotada, $\forall t$ (teorema de estabilidad de Dirichlet [42]), es decir, bajo la evolución de \mathcal{H} dada en (2.56) se satisface que $C_2 \|\mathbf{z}\|^2 \leq \mathcal{H}(\mathbf{z}) \leq C_1 \|\mathbf{z}\|^2$.

2.2.2. Representación en variables espectrales

Finalmente el sistema (2.49) se expresa en las llamadas variables espectrales. Estas diagonalizan la parte lineal del sistema y se utilizan en el capítulo 4 para el cálculo de la forma Normal de Birkhoff.

Tomando como partida el hecho de que la estructura Hamiltoniana se preserve bajo el cambio de variables (2.58). Las ecuaciones de movimiento en estas nuevas variables

$$\dot{Q}'_{i,d} = \frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial P'_{i,d}} = P'_{i,d}, \quad \dot{P}'_{i,d} = -\frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial Q'_{i,d}} = -\omega_i^2 Q'_{i,d}, \quad \text{con } i \in [2, N], \quad d \in [1, D], \quad (2.61)$$

expresado como sistema

$$\begin{pmatrix} \dot{Q}'_{i,d} \\ \dot{P}'_{i,d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega_i^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q'_{i,d} \\ P'_{i,d} \end{pmatrix}, \quad (2.62)$$

calculando los valores propios $\rho_{i\pm}$ de la matriz que aparece en (2.62)

$$\begin{aligned} \rho_{i\pm}^2 + \omega_i^2 &= 0, \\ \rho_{i\pm} &= \pm i\omega_i, \end{aligned} \quad (2.63)$$

también se determina de manera explícita la matriz $A_{(i)}$ (el subíndice i indica que hay una matriz A para cada partícula i), como aquella cuyas columnas son los vectores propios generados por los valores propios $\rho_{i\pm}$, ésta matriz y su inversa se muestran a continuación.

$$A_{(i)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\omega_i}} & \frac{1}{\sqrt{2\omega_i}} \\ -i\sqrt{\frac{\omega_i}{2}} & i\sqrt{\frac{\omega_i}{2}} \end{pmatrix}, \quad (2.64)$$

$$A_{(i)}^{-1} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\omega_i}{2}} & \frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} \\ \sqrt{\frac{\omega_i}{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} \end{pmatrix}. \quad (2.65)$$

La matriz $A_{(i)}^{-1}$ define la transformación (2.66) que lleva las variables P' y Q' a los modos normales de vibración $a, a^* \in \mathbb{C}$.

$$\begin{pmatrix} a_{i,d} \\ a_{i,d}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\omega_i}{2}} & \frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} \\ \sqrt{\frac{\omega_i}{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q'_{i,d} \\ P'_{i,d} \end{pmatrix}, \quad i \in [2, N], \quad d \in [1, D]. \quad (2.66)$$

En resumen, lo que se tiene es un nuevo conjunto de variables, en las cuales se puede monitorear de manera directa la forma en que se distribuye la energía en cada modo de vibración y con las ecuaciones de movimiento derivadas de esta representación. También es posible dar seguimiento a la evolución de la energía en el espectro a lo largo del tiempo, como se muestra en el capítulo 5.

Una primera ventaja del uso de los modos normales a_i es que la parte cuadrática del Hamiltoniano \mathcal{H}_2 toma una forma muy reducida en comparación con expresiones previas. Sin embargo, lo mas relevante

es que en el análisis hecho en el capítulo 4, resulta ser muy conveniente esta representación, para buscar términos resonantes en el Hamiltoniano. Del sistema (2.66) se tienen las ecuaciones

$$a_{i,d} = \sqrt{\frac{\omega_i}{2}} Q'_{i,d} + \frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} P'_{i,d}, \quad (2.67)$$

$$a_{i,d}^* = \sqrt{\frac{\omega_i}{2}} Q'_{i,d} - \frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} P'_{i,d}, \quad (2.68)$$

y las relaciones inversas

$$Q'_{i,d} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_i}} (a_{i,d} + a_{i,d}^*), \quad (2.69)$$

$$P'_{i,d} = i\sqrt{\frac{\omega_i}{2}} (a_{i,d}^* - a_{i,d}). \quad (2.70)$$

Multiplicando $a_{i,d}$ por $a_{i,d}^*$ de acuerdo a las ecuaciones (2.67) y (2.68), se observa de forma directa que se cumple la relación de

$$a_{i,d} a_{i,d}^* = \left(\sqrt{\frac{\omega_i}{2}} Q'_{i,d} + \frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} P'_{i,d} \right) \left(\sqrt{\frac{\omega_i}{2}} Q'_{i,d} - \frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} P'_{i,d} \right) = \frac{1}{2} Q_{i,d}'^2 + \frac{1}{2\omega_i} P_{i,d}'^2, \quad (2.71)$$

multiplicando ambos lados de la ecuación (2.71) por ω_i se tiene:

$$\omega_i a_{i,d} a_{i,d}^* = \frac{1}{2} \omega_i^2 Q_{i,d}'^2 + \frac{1}{2} P_{i,d}'^2, \quad (2.72)$$

sumando sobre todas las partículas $i = 2 \dots N$, se tiene justamente la ecuación para \mathcal{H}_2 en una dimensión ($D = 1$), sumando sobre todas las dimensiones $d = 1 \dots D$ y recordando la relación $\omega_l = \frac{k_2 \lambda_l}{m}$, para $l \geq 2$, entonces se recupera la parte cuadrática \mathcal{H}_2 del Hamiltoniano (2.41), en términos de las variables espectrales (2.73). Las frecuencias ω_i son las mismas para todas las dimensiones, es decir, no dependen del índice d . De esta manera:

$$\mathcal{H}_2 = \sum_{d=1}^D \sum_{i=2}^N \frac{1}{2} \omega_i^2 Q_{i,d}'^2 + \sum_{d=1}^D \sum_{i=2}^N \frac{1}{2} P_{i,d}'^2 = \sum_{d=1}^D \sum_{i=2}^N \omega_i a_{i,d} a_{i,d}^*. \quad (2.73)$$

Con el resultado anterior y con el cambio de variables de $P'_{i,d}$ y $Q'_{i,d}$ a las variables espectrales (2.71) y (2.72), podemos expresar el *Hamiltoniano* \mathcal{H} en términos de $a_{i,d}$ y $a_{i,d}^*$ con $i \in [2, N]$, $d \in [1, D]$.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \omega_l a_{l,d} a_{l,d}^* + \frac{k_4}{4} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4=2}^N \frac{\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}}{4m^2 \sqrt{\omega_{l_1} \omega_{l_2} \omega_{l_3} \omega_{l_4}}} \\ & \cdot (a_{l_1, d_1} + a_{l_1, d_1}^*) (a_{l_2, d_1} + a_{l_2, d_1}^*) (a_{l_3, d_2} + a_{l_3, d_2}^*) (a_{l_4, d_2} + a_{l_4, d_2}^*), \end{aligned} \quad (2.74)$$

En donde se cambio el índice i por el l para conservar la notación de la ecuación (2.48). Un aspecto fundamental es la preservación de la estructura Hamiltoniana que subyace en el hecho de que el Hamiltoniano en (2.71) se obtuvo mediante la composición de transformaciones simplécticas, por lo tanto se satisfacen las ecuaciones de movimiento:

$$\begin{pmatrix} \dot{a}_{l,d} \\ \dot{a}_{l,d}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a_{l,d}} \\ -i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a_{l,d}^*} \end{pmatrix},$$

o equivalentemente

$$\dot{a}_{l,d} = -i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a_{l,d}^*}, \quad (2.75)$$

$$\dot{a}_{l,d}^* = i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a_{l,d}}. \quad (2.76)$$

Se define $\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ como:

$$\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} = \frac{\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}}{4m^2 \sqrt{\omega_{l_1} \omega_{l_2} \omega_{l_3} \omega_{l_4}}}. \quad (2.77)$$

El factor $\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}$, con $l_i = 2 \dots N$ y $i = 1 \dots 4$ requiere un análisis más detallado debido a que $|\omega_{k_l}| \ll 1$, si $l \mapsto 2$. Este análisis se encuentra en la sección 3.1.

Continuando con la expresión para el Hamiltoniano (2.74), se introducen los cambios de variable (2.69) y (2.70) en la parte correspondiente con U_4 , se desarrollan los productos de binomios y se simplifica hasta obtener sumas de monomios de cuarto orden en las variables a y a^* . Obteniendo así la expresión para el Hamiltoniano

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \omega_l a_{l,d} a_{l,d}^* + \frac{k_4}{4} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4=2}^N \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} [\\ & a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2} a_{l_4, d_2} + a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2} a_{l_4, d_2}^* + a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_4, d_2} a_{l_3, d_2}^* + a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2}^* \\ & + a_{l_1, d_1} a_{l_3, d_2} a_{l_4, d_2} a_{l_2, d_1}^* + a_{l_1, d_1} a_{l_3, d_2} a_{l_2, d_1}^* a_{l_4, d_2}^* + a_{l_1, d_1} a_{l_4, d_2} a_{l_2, d_1}^* a_{l_3, d_2}^* + a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1}^* a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2}^* \\ & + a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2} a_{l_4, d_2} a_{l_1, d_1}^* + a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2} a_{l_1, d_1}^* a_{l_4, d_2}^* + a_{l_2, d_1} a_{l_4, d_2} a_{l_1, d_1}^* a_{l_3, d_2}^* + a_{l_2, d_1} a_{l_1, d_1}^* a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2}^* \\ & + a_{l_3, d_2} a_{l_4, d_2} a_{l_1, d_1}^* a_{l_2, d_1}^* + a_{l_3, d_2} a_{l_1, d_1}^* a_{l_2, d_1}^* a_{l_4, d_2}^* + a_{l_4, d_2} a_{l_1, d_1}^* a_{l_2, d_1}^* a_{l_3, d_2}^* + a_{l_1, d_1}^* a_{l_2, d_1}^* a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2}^*], \end{aligned} \quad (2.78)$$

que es una ecuación más extensa comparada con la presentada en (2.66) pero simple en el sentido, de que en la parte no lineal sólo aparecen monomios de cuarto orden. Cabe notar que son 16 combinaciones de índices los que dan lugar a igual número de diferentes combinaciones de monomios.

La ecuación (2.78) se simplifica utilizando un argumento de simetría ante permutación de índices. Por ejemplo, los dos casos siguientes y el caso general se plantea en la proposición 11.

$$\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} [a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2}] = \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_4 l_3} [a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2} a_{l_4, d_2}^*], \quad (2.79)$$

$$\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} [a_{l_1, d_1}^* a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2}] = \tilde{\Gamma}_{l_4 l_2 l_1 l_3} [a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2}^*], \quad (2.80)$$

Proposición 11. Los coeficientes $\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}$, son invariantes ante permutaciones de índices, lo cual se refleja en una reducción en la diversidad de monomios que constituyen U_4 , como se plantea a continuación.

$$\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{(1)} = \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4},$$

$$\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{(2)} = \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} + \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_4 l_3} + \tilde{\Gamma}_{l_1 l_4 l_3 l_2} + \tilde{\Gamma}_{l_4 l_2 l_3 l_1} = 4\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4},$$

$$\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{(3)} = \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} + \tilde{\Gamma}_{l_3 l_4 l_1 l_2} + \tilde{\Gamma}_{l_4 l_1 l_2 l_3} + \tilde{\Gamma}_{l_3 l_1 l_2 l_4} + \tilde{\Gamma}_{l_3 l_2 l_1 l_4} + \tilde{\Gamma}_{l_4 l_2 l_1 l_3} = 6\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4},$$

$$\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{(4)} = \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} + \tilde{\Gamma}_{l_2 l_1 l_3 l_4} + \tilde{\Gamma}_{l_3 l_2 l_1 l_4} + \tilde{\Gamma}_{l_4 l_2 l_3 l_1} = 4\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4},$$

$$\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{(5)} = \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}.$$

Demostración 11. Recordando la definición para $\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ en la ecuación (2.77) y por lo tanto, la definición de $\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ de la ecuación (2.46).

$$\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} = \frac{\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}}{4\sqrt{\omega_{l_1} \omega_{l_2} \omega_{l_3} \omega_{l_4}}},$$

$$\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4} = \sum_{i,j=1}^N c_{ij} (M_{il_1} - M_{jl_1}) (M_{il_2} - M_{jl_2}) (M_{il_3} - M_{jl_3}) (M_{il_4} - M_{jl_4}).$$

Se observa que intercambiando por ejemplo los subíndices l_4 y l_3 se tiene

$$\begin{aligned} \Gamma_{l_1 l_2 l_4 l_3} &= \sum_{i,j=1}^N c_{ij} (M_{il_1} - M_{jl_1}) (M_{il_2} - M_{jl_2}) (M_{il_4} - M_{jl_4}) (M_{il_3} - M_{jl_3}), \\ &= \sum_{i,j=1}^N c_{ij} (M_{il_1} - M_{jl_1}) (M_{il_2} - M_{jl_2}) (M_{il_3} - M_{jl_3}) (M_{il_4} - M_{jl_4}) = \Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}, \end{aligned}$$

por lo tanto

$$\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_4 l_3} = \frac{\Gamma_{l_1 l_2 l_4 l_3}}{4\sqrt{\omega_{l_1} \omega_{l_2} \omega_{l_4} \omega_{l_3}}} = \frac{\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}}{4\sqrt{\omega_{l_1} \omega_{l_2} \omega_{l_3} \omega_{l_4}}} = \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}. \quad (2.81)$$

□

Esto se extiende para el intercambio de cualquier par de índices, consecuencia de la construcción simétrica de la $\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}$.

Por lo tanto, con este cambio de notación la ecuación (2.78) se convierte en

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \omega_l a_{l,d} a_{l,d}^* + \frac{k_4}{4} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4=2}^N \left[\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{(1)} a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2} a_{l_4, d_2} + \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{(2)} a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2} a_{l_4, d_2}^* \right. \\ &\quad \left. + \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{(3)} a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2} + \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{(4)} a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1}^* a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2} + \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{(5)} a_{l_1, d_1}^* a_{l_2, d_1}^* a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2}^* \right], \quad (2.82) \end{aligned}$$

la cual es una forma de compactar la notación. La parte de orden cuártico de la ecuación (2.78) muestra el acoplamiento entre los diferentes modos espectrales. Finalmente, con el resultado de la proposición (11), se expresa el Hamiltoniano \mathcal{H} de la ecuación (2.82), como se muestra

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{d=1}^D \sum_{l=2}^N \omega_l a_{l,d} a_{l,d}^* + \frac{k_4}{4} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4=2}^N \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \left[a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2} a_{l_4, d_2} + 4a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2} a_{l_4, d_2}^* \right. \\ &\quad \left. + 6a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2} + 4a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1}^* a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2} + a_{l_1, d_1}^* a_{l_2, d_1}^* a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2}^* \right]. \quad (2.83) \end{aligned}$$

Observación 4. En el sistema (2.83) aparecen combinaciones de variables espectrales con subíndices d_1 y d_2 , esto indica que puede haber transferencia de energía vibracional entre diferentes modos de oscilaciones en diferentes direcciones. Son estos términos no lineales los responsables de la riqueza dinámica del sistema.

Las variables espectrales son de gran utilidad, ya que al calcular las ecuaciones de movimiento apoyados en la estructura Hamiltoniana, se determina inmediatamente qué modos de vibración están relacionados entre sí. La forma de la ecuación (2.83) tiene toda la información de la dinámica del sistema, sin embargo se puede hacer una simplificación utilizando argumentos de *Teoría de formas normales*, como se ve en el capítulo 4. donde se muestra el mecanismo de eliminación de monomios no resonantes utilizando transformaciones simplécticas derivadas del flujo Hamiltoniano dentro de una vecindad alrededor del origen. En el capítulo siguiente se hace un análisis de matrices de conectividad para diferentes configuraciones de redes.

Capítulo 3

Análisis espectral de la matriz de conectividad para diferentes configuraciones

Como ya se ha dicho, cada configuración de partículas tiene asociada una matriz de conectividad dada por (2.4), el análisis espectral de esta matriz es requerido ya que revela aspectos dinámicos en la parte cuadrática del Hamiltoniano \mathcal{H} . Para la implementación numérica se utilizaron las paqueterías *GSL-BLAS*, [43] [44] que son un conjunto de librerías que forman un robusto sistema de álgebra lineal numérica, el resto de las librerías son las integradas en C++ estándar (gcc) [45] incluyendo las librerías *mesa* para la visualización a través de *OpenGL* [46], [47].

Los ejemplos que discutimos son tanto unidimensionales como en más dimensiones, se determina su relación de dispersión y las funciones propias correspondientes. Un primer resultado de este estudio sugiere que a nivel lineal, los modos altos de vibración se pueden localizar en zonas de mayor aglomeración de partículas, como se mostrará a detalle en algunos de los casos seleccionados que se muestran más adelante. Sin embargo, antes de continuar se hace una comparación entre un caso analítico y uno numérico en el caso lineal reducido, para estimar el orden de error.

3.1. Cálculo de frecuencias y Modos Normales de Vibración armónicos

El caso lineal reducido corresponde a un modelo de red unidimensional compuesto por N partículas unidas entre sí por resortes sujetos a la ley de Hooke. Éste es un problema clásico de mecánica analítica [48] que sirve para comparar resultados numéricos posteriores en el que podamos incluir términos no lineales. Basta con recordar la parte lineal del modelo 2.18, ya que por ahora solo se harán cálculos sobre esta parte. De esta manera:

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N |\mathbf{p}_i|^2 + \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_2}{2} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^2,$$

tomando las ecuaciones de movimiento para \mathcal{H}_2 , $i = 1 \dots N$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m}, \quad (3.1)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial q_i} = -k_2[(q_i - q_{i-1}) + (q_i - q_{i+1})], \quad (3.2)$$

la ecuación (3.2) se obtiene al considerar que la interacción de la partícula i -ésima solo ocurre con sus vecinos inmediatos $i - 1$ y $i + 1$, es decir, son los únicos dos casos donde la matriz c_{ij} (2.4) es diferente de cero con $i, j = 1 \dots N$. Por otra parte, calculando \ddot{q}_i en términos de \dot{p}_i a partir de la ecuación (3.1) y sustituyendo en (3.2), se tiene

$$\begin{pmatrix} \ddot{q}_1 \\ \ddot{q}_2 \\ \vdots \\ \ddot{q}_N \end{pmatrix} = \frac{k_2}{m} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \vdots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_N \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

donde la parte derecha de la ecuación (3.3) contiene la matriz de conectividad \mathbf{C}_D , con $D = 1$, multiplicada por $\frac{k_2}{m}$.

Se propone la solución como la superposición de dos ondas de igual amplitud pero que viajan en sentido opuesto

$$q_i(l) = M_{il}[e^{i\omega_l t} + e^{-i\omega_l t}], \quad (3.4)$$

se imponen las condiciones de frontera, (tipo Neumann), es decir, se debe satisfacer $\dot{q}_i = 0$ para $i = 1$ y $i = N$. Por otra parte, l representa el número de onda y M_{il} representa la entrada i del vector propio l . Se sustituye la ecuación (3.4) en (3.3) y se imponen las condiciones de frontera, de donde la ecuación para vectores y valores propios es.

$$\omega_l^2 \begin{pmatrix} M_{1l} \\ M_{2l} \\ \vdots \\ M_{Nl} \end{pmatrix} = \frac{k_2}{2m} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \vdots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{1l} \\ M_{2l} \\ \vdots \\ M_{Nl} \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Sin embargo, la condición de frontera libre solo permite soluciones del tipo

$$M_{il} = \cos(\pi il/N), \quad (3.6)$$

donde (3.6) representa la i -ésima entrada del vector propio l . Al sustituir el vector propio en (3.5) se tienen la relación siguiente,

$$\omega_l^2 = \frac{k_2}{2m}[2 - 2\cos(2\pi l/N)]. \quad (3.7)$$

Comparando con la ecuación (2.59) que relaciona los valores propios λ_l y las frecuencias ω_l , se tiene:

$$\lambda_l = 4[1 - \cos(2\pi l/N)], \quad (3.8)$$

utilizando la identidad $4 \sin^2(\pi l/N) = 1 - \cos(\pi l/2N)$, se tiene la relación de dispersión:

$$\omega_l^2 = \frac{\sqrt{8}k_2}{m} \sin^2(\pi l/2N). \quad (3.9)$$

En la Figura 3.1 a) se compara la gráfica de la ecuación (3.9) con datos obtenidos numéricamente, en la misma figura, en la parte b) se muestra la gráfica de la diferencia entre datos analíticos y numéricos.

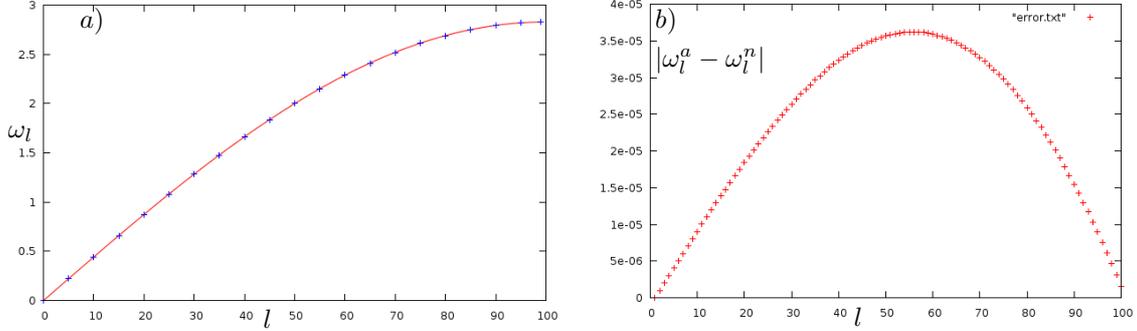


Figura 3.1: Espectro numérico y analítico del sistema (3.5). a) Los puntos + representan los cálculos numéricos, la línea continua representa los analíticos, b) Gráfica de la diferencia de resultados analíticos ω_l^a y numéricos ω_l^n .

En este ejemplo también se puede evaluar el límite del factor $\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ dado en (2.77) cuando alguna de las frecuencias $\omega_{l_j} \rightarrow 0$, con $l = 1 \dots N$, $j = 1 \dots 4$. Partiendo de la expresión $\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}$

$$\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} = \frac{\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}}{4\sqrt{\omega_{l_1} \omega_{l_2} \omega_{l_3} \omega_{l_4}}},$$

que es el producto de factores con la forma

$$\tilde{\gamma}_{ij}^l = \frac{M_{il} - M_{jl}}{\sqrt{\omega_l}}, \quad (3.10)$$

sustituyendo las posiciones i y j de los vectores propios, donde $M_{il} = \cos(2\pi il/N)$ en (3.6) (análogamente para M_{ij}), sustituyendo w_l con la relación de dispersión (3.9) y tomando el límite cuando $\omega_l \rightarrow 0$ (el hecho de que $\omega_l \rightarrow 0$ se interpreta como la existencia de un modo de vibración muy largo). También se hace uso del resultado para los valores propios como se indica en la ecuación (2.59), es decir, están ordenados de menor a mayor, el caso ω_1 corresponde a traslaciones, el caso ω_2 corresponde a la onda mas larga soportada por la red. Cuando la cadena es muy extensa $N \rightarrow \infty$, caben en ella modos cada vez mas largos siendo ω_2 la cota para la frecuencia más baja, por lo tanto el límite que se debe analizar es

$$\lim_{\omega_2 \rightarrow 0} \tilde{\gamma}_{ij}^2 = \lim_{\omega_2 \rightarrow 0} \frac{M_{i2} - M_{j2}}{\sqrt{\omega_2}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\cos(4\pi i/N) - \cos(4\pi j/N)}{\sqrt{\sqrt{8} \frac{k_2}{m} \sin^2(2\pi/N)}},$$

aproximando las funciones por los primeros elementos de su expansión en Taylor

$$\lim_{\omega_2 \rightarrow 0} \tilde{\gamma}_{ij}^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1 - \frac{1}{2}(4\pi i/N)^2 - 1 + \frac{1}{2}(4\pi j/N)^2}{2\sqrt{\sqrt{8} \frac{k_2}{m} (2\pi/N)^2} + O(N^2)},$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{4\pi(j^2 - i^2)}{2\sqrt{\sqrt{8} \frac{k_2}{m}}} \frac{1}{N^{3/2}} = 0.$$

por lo tanto, para este caso, el límite está definido y con el factor $\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}$. Para otras configuraciones de redes, la forma de las funciones propias y la relación de dispersión no necesariamente tiene una expresión analítica, sin embargo, este factor se puede determinar numéricamente.

3.2. Estudio numérico de los modos normales

A continuación se muestra un conjunto de configuraciones de redes en las cuales se construye la matriz de conectividad y se determina de manera numérica la relación de dispersión y las funciones propias. Los distintos ejemplos se muestran para dimensiones, D1 una dimensión, D2 dos dimensiones y D3 tres dimensiones.

Ejemplo: 1 — D1 Cadena lineal homogénea

Se construye una cadena unidimensional $N = 100$ de partículas (ver Figura 3.2 a), donde cada partícula tiene interacción únicamente con sus vecinos inmediatos. En la misma Figura en la parte b) se muestra la relación de dispersión que coincide con la obtenida analíticamente en la sección anterior. La matriz de interacción está representada en la Figura (3.3 a). Se fijaron los parámetros $m = 1$ y $k_2 = 1$, en esta Figura el color indica el número de vecinos (siendo el mismo para todas las partículas, excepto para las de la frontera). En la parte b) se muestra la gráfica de todo el conjunto de las funciones propias sobre el intervalo $[0, N]$. Cada gráfica sobre el eje horizontal es una función propia diferente.

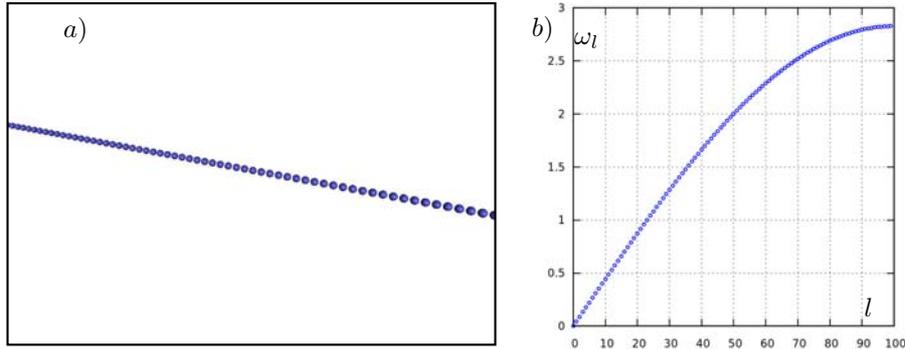


Figura 3.2: a) Se muestra una cadena compuesta por $N = 100$ partículas distribuidas uniformemente, en una dimensión $D = 1$. b) Se muestran las frecuencias contra el número de onda correspondientes a la misma cadena, calculadas numéricamente (relación de dispersión).

Este ejemplo de cadena homogénea de interacción con primeros vecinos ya se ha resuelto analíticamente en la sección 3.1, sin embargo, el objetivo es comparar los resultados tanto analíticos como numéricos para tener una estimación de la precisión del cálculo numérico. La observación tanto de los resultados exactos como los aproximados son consistentes hasta $O(10^{-5})$ tomando el máximo de la diferencia como lo muestra la Figura 3.1, donde se observa en la parte a) los cálculos analíticos en la línea continua y

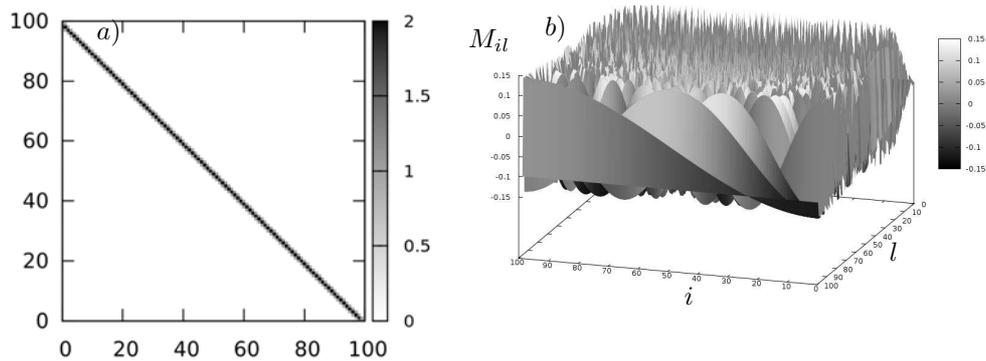


Figura 3.3: a) Representación gráfica de la matriz de conectividad para el ejemplo de una cadena homogénea. b) Funciones propias para el mismo ejemplo.

los numéricos como puntos, en la parte b) se muestra el valor absoluto de la diferencia de los cálculos analíticos y teóricos. Se puede observar en esta gráfica que los errores numéricos más grandes se encuentran para las frecuencias centrales y el error decae hacia los extremos.

En configuraciones de redes más complejas, resulta menos evidente encontrar de manera explícita soluciones analíticas, sin embargo, con el conjunto de herramientas numéricas se puede tener una aproximación a la solución y entender cualitativamente algunos aspectos de cada configuración, teniendo en cuenta que este análisis se deriva de la matriz de conectividad y que corresponde al caso lineal del problema.

Para la visualización de los vectores propios en $D = 1$ utilizamos la matriz M_{il} , que representa la entrada i -ésima del l -ésimo vector propio.

Ejemplo: 2 — D1 Cadena de partículas en una dimensión: una aglomeración fuera del centro

Ésta configuración se propone para conocer el caso de un cambio abrupto en la densidad de partículas a lo largo de la cadena. Se observó que exhibe un comportamiento de localización de energía para los modos altos de vibración. En la gráfica 3.4 a) se observa la configuración de la cadena, la cual es homogénea todas partes, excepto en una región ΔL , donde hay un cambio súbito en la densidad de partículas. En esta región están cercanas 5 partículas entre sí, recordando que cercano quiere decir que las entradas de la matriz c de la ecuación (2.4) son $c_{ij} = 1$, formando un cúmulo o aglomerado de ellas. La razón para que esta zona de aglomeración no este en el centro es únicamente para descartar o reducir si los hubiera, efectos debidos a la simetría de la cadena.

En la gráfica 3.4 b) se observa una banda de separación entre los valores propios asociados a las altas frecuencias y los asociados a las demás. Esto puede ser interpretado como que existen esencialmente dos regiones de vibración separadas por una banda. En la figura 3.7 a) se muestra una representación gráfica de la matriz de conectividad y en la parte b) se muestran las gráficas de las funciones propias.

La gráfica de la Figura 2 muestra dos funciones propias asociadas cada una a las dos diferentes valores

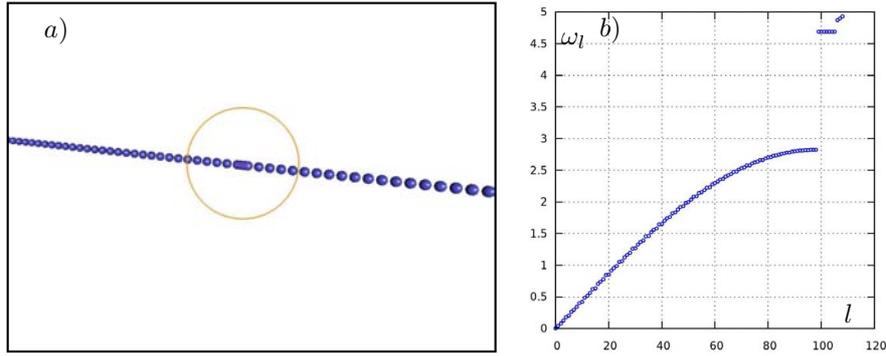


Figura 3.4: a) Cadena con una zona de aglomeración de partículas. b) Número de onda contra frecuencia (relación de dispersión).

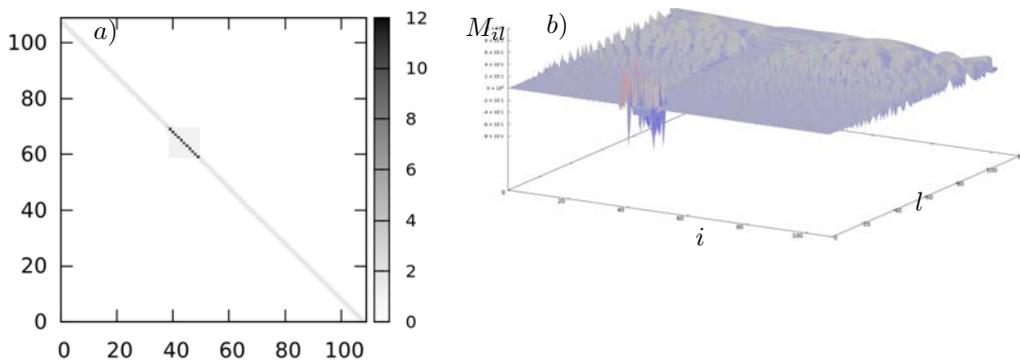
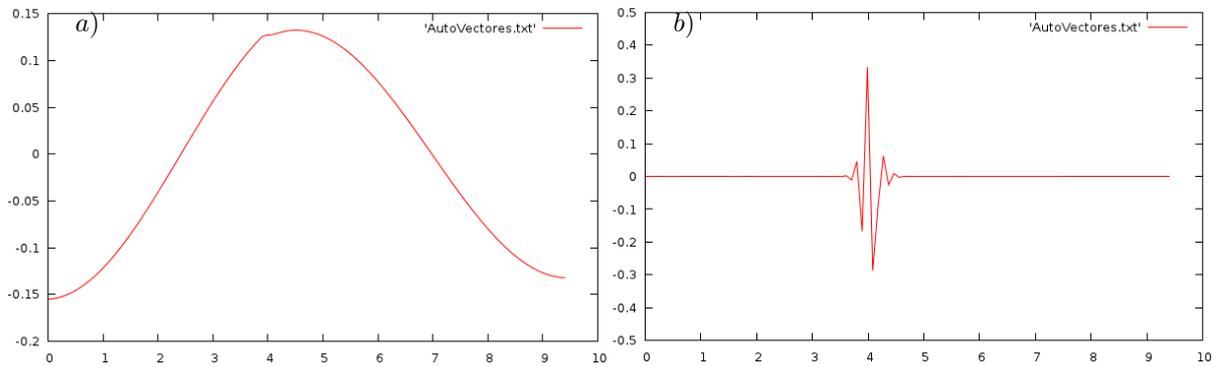


Figura 3.5: a) Matriz de conectividad para el ejemplo de una cadena con una aglomeración. b) Funciones propias ordenadas de las asociadas a mayor frecuencia hacia las de menor frecuencia.

propios, la parte a) corresponde a una función propia de baja frecuencia y la parte b) corresponde a un valor propio de alta frecuencia. Esta última gráfica revela que una parte de la energía de vibración asociada a las altas frecuencias se localiza espacialmente en la región de mayor densidad, es decir, para el caso lineal hay una localización de tipo espacial de la energía en la zona del espectro correspondiente a las altas frecuencias. En las gráficas 3.4 a) y b) se observa el conjunto de funciones propias ordenadas mediante el número de onda, donde aparece una localización de los modos de vibración para un conjunto de funciones propias asociadas a los modos de alta frecuencia.

Ejemplo: 3 — D1 113 partículas: dos regiones de aglomeración no simétricas

En este caso las dos regiones de aglomeración no están igualmente distribuidas sobre la cadena y cada región cuenta con un número diferente de partículas que forman el aglomerado como se muestra en la Figura 3.6 a), esto resulta útil para minimizar los efectos debidos a simetrías. Las marcas sobre la misma imagen indican la posición de cada región de aglomeración a lo largo de la cadena. El cambio



captiona) Se muestra la función propia asociada a una de las bajas frecuencias. b) Se muestra la función propia asociada a la más alta frecuencia.

en la densidad de la cadena en las regiones de aglomeración es abrupto, esto le confiere a la cadena una estructura conformacional singular que se refleja en la matriz de conectividad y en las funciones propias como se indica en la Figura 3.6 b).

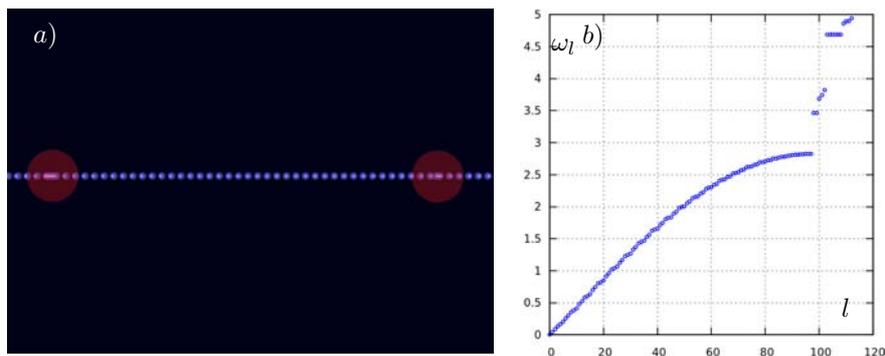


Figura 3.6: a) Se muestra una cadena compuesta por $N = 113$ partículas con dos regiones de aglomeración y en una dimensión $D = 1$, b) Se muestran las frecuencias contra el número de onda correspondientes a la misma cadena, calculadas numéricamente.

La primer zona de aglomeración cuenta con 5 partículas vecinas mientras la segunda cuenta con 10 partículas. En este caso se observa una división del espectro de vibración en principalmente tres regiones, una de baja, una media y una de alta frecuencia de acuerdo a la Figura 3.6 b). En la Figura ?? se muestra en el caso a) la primer función propia sin considerar las funciones propias asociadas a traslaciones y en el caso b) se muestra la función propia asociada a la más alta frecuencia.

En la Figura 3.8 a) se muestran la matriz de conectividad y en 3.8 b) se muestran las funciones propias. En estas últimas gráficas se observa que las altas frecuencias se localizan espacialmente, pero

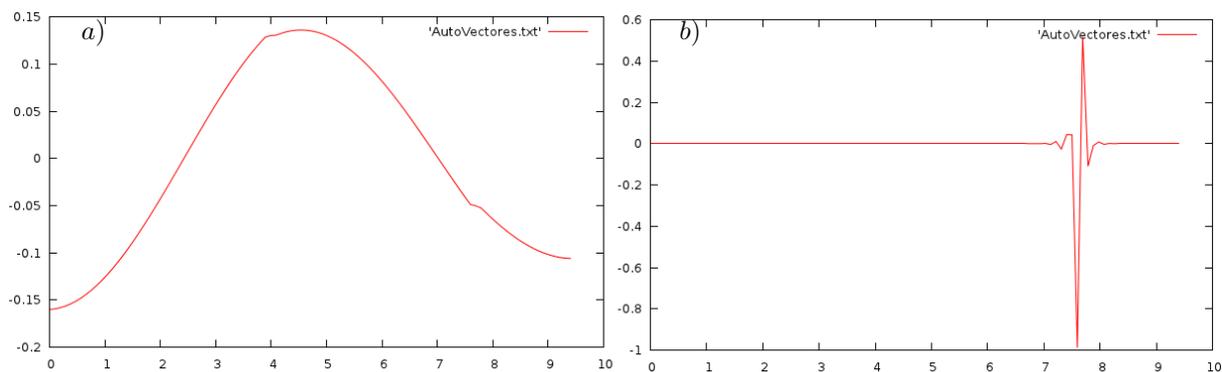


Figura 3.7: Cadena con dos regiones de aglomeración. a) Modo de vibración correspondiente a una baja frecuencia. b) Modo de vibración correspondiente a la mas alta frecuencia.

además, en dos regiones, una de frecuencias media que corresponde a la región espacial del conglomerado de 5 partículas y las de alta frecuencia que se localizan en el conglomerado de 10 partículas.

También se aprecia que para esta configuración de partículas no existen modos de vibración que se localicen en ambas regiones de aglomeración simultáneamente.

Ejemplo: 4 — D1. Cadena de partículas: tres regiones de aglomeración

Para este caso se utilizan tres regiones de aglomeración distribuidas de manera no simétrica sobre la cadena. Cada región de aglomeración cuenta con 5 partículas vecinas, todas ellas interactuando entre sí como se muestra en la Figura 3.9.

En la Figura 3.10 se muestran dos funciones propias, el caso a) corresponde una función propia asociada a la más baja frecuencia, donde se puede observar que hay una deformación de la función propia respecto a la misma cadena en las zonas de aglomeración. Este modo de vibración o función propia. Puede pasar por los sitios donde se concentran las partículas y apenas sufrir una perturbación pequeña, es decir, los tres picos sobre la gráfica principal son pequeños respecto a la gráfica completa. El caso b) corresponde a la función propia asociada a la función de más alta frecuencia, donde se observa la localización de energía para este modo de vibración en una zona correspondiente a una aglomeración. Las funciones propias de alta frecuencia muestran localizaciones espacial, cada una en las diferentes aglomeraciones, esto se aprecia con mayor facilidad en la gráfica 3.11, lo más relevante de este comportamiento es al igual que en los casos anteriores, que la mayor parte de la energía se acumula en las regiones donde las partículas de la cadena tienen mayor interacción y lo hace en la región del espectro de las altas frecuencias.

En la gráfica 3.11, se presenta en la parte a) la matriz de interacción representada como imagen donde a cada pixel de color se le asocia con el valor de la matriz en la misma posición, se observan tres bloques sobre la diagonal que corresponden cada uno a las aglomeraciones de partículas. Por supuesto la existencia de estos bloques es la que determina la forma singular de los valores y las funciones propias. b) de la

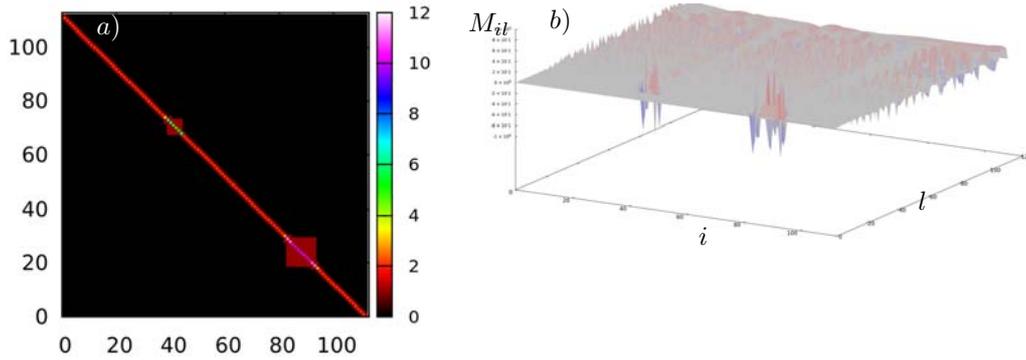


Figura 3.8: a) Matriz de conectividad para el ejemplo de una cadena con dos aglomeraciones, b) Funciones propias.

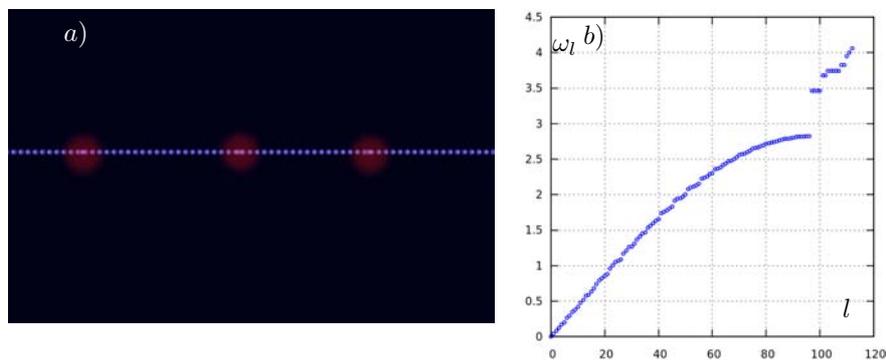


Figura 3.9: a) Cadena de partículas con tres regiones de aglomeración. b) Valores propios correspondientes a dicha cadena.

misma gráfica se observan regiones de localización de la energía en los modos de vibración relacionados con las frecuencias más altas y son justamente las que en la gráfica 3.9 b) se alejan de la tendencia de la gráfica en la parte superior.

También ocurre que ningún modo de vibración se localiza en más de una región de aglomeración simultáneamente, para el caso analizado en este ejemplo. Existen otros casos con mayor simetría en la distribución de las zonas de aglomeración donde este comportamiento es diferente, como se verá más adelante.

Todos los ejemplos vistos hasta este momento tienen la característica de cambios abruptos en la densidad de las partículas que conforman la cadena, son las llamadas regiones de aglomeración. Sin embargo puede ocurrir que el cambio de zonas de menor densidad a mayor densidad sea gradual, esta forma de cambiar la densidad tiene por supuesto muchas variantes, cada una de ellas con propiedades particulares.

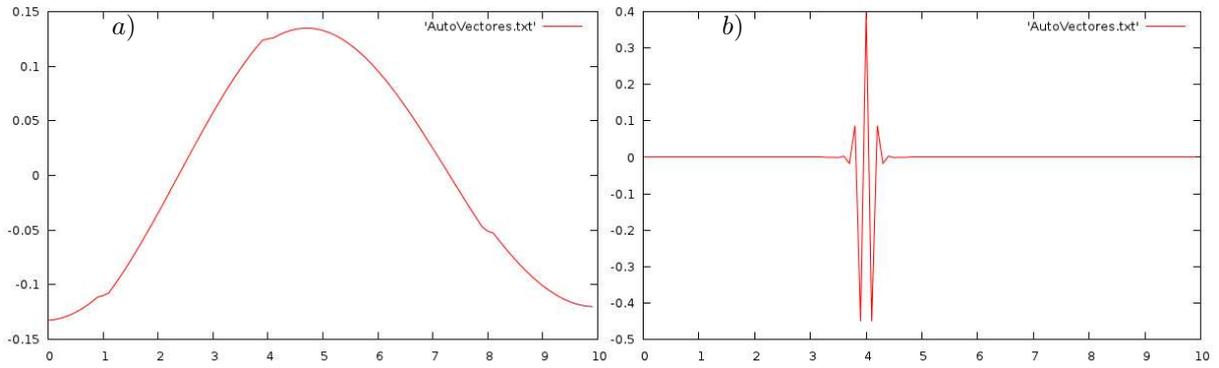


Figura 3.10: Cadena con tres regiones de aglomeración. a) Modo de vibración correspondiente a una baja frecuencia. b) Modo de vibración correspondiente a la más alta frecuencia.

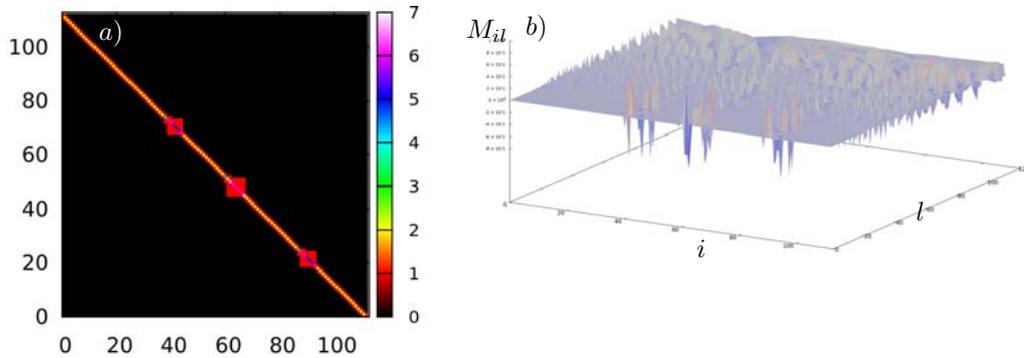


Figura 3.11: a) Matriz de conectividad para el caso de tres regiones de aglomeración. b) Superficie formada con las funciones propias para el mismo caso.

La observación para este ejemplo es la permanencia de localización de los modos altos de vibración en las regiones de mayor aglomeración, y esto ocurre incluso cuando no hay una amplia banda de separación en la relación de dispersión.

Ejemplo: 5 — D1. Cadena con una distribución aleatoria de partículas

En este ejemplo se presenta una cadena donde la distancia entre partículas se genero de manera aleatoria en un rango entre 0.1 y 3.0 unidades de distancia. La longitud total de la cadena es de 10 unidades. Esta distancia se busco que fuera mucho mayor que una simple perturbación, de tal manera que se generen aglomeraciones de diferentes tamaños a lo largo de la cadena, dado un radio crítico R_c , que se determina como el mínimo que garantiza que todas las partículas tienen al menos un vecino.

En la Figura 3.12 a) se muestra la cadena con distribución aleatoria de partículas a lo largo de una di-

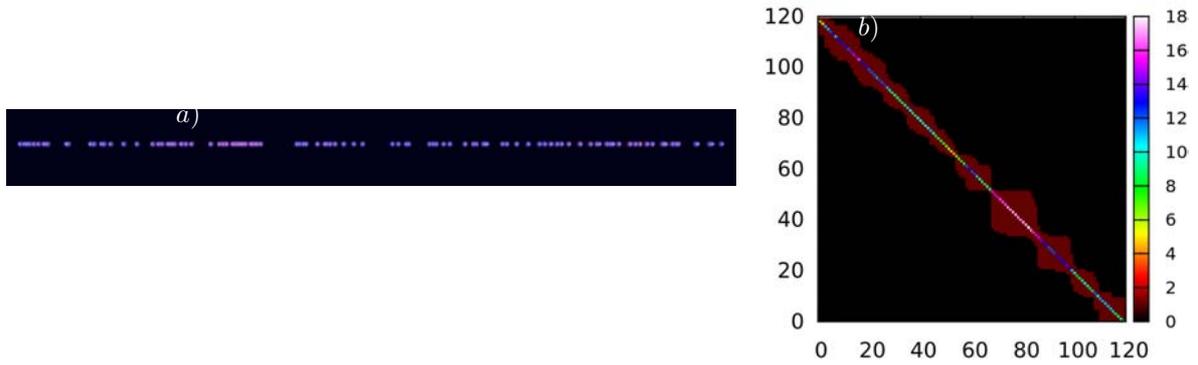


Figura 3.12: a) Cadena con distribución aleatoria. b) Matriz de conectividad para la misma cadena.

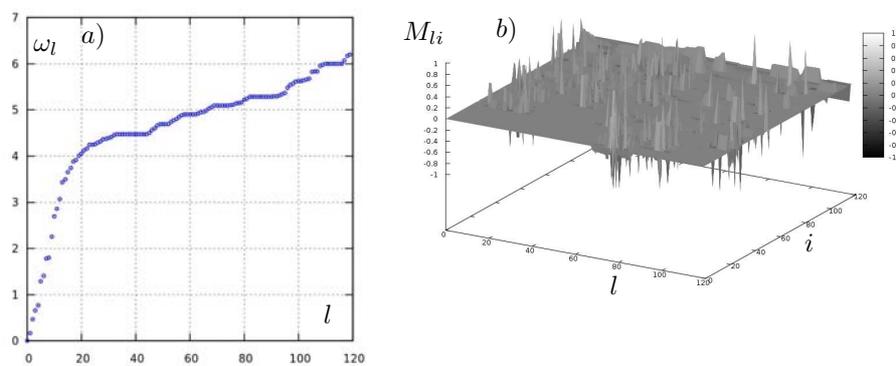


Figura 3.13: a) Relación de dispersión para el caso de una cadena unidimensional con distribución aleatoria. b) Superficie formada con las funciones propias para el mismo caso.

mensión y en b) se muestra la imagen de la matriz de interacción para la misma cadena, se puede observar que aparecen algunas regiones de aglomeración ubicadas de manera asimétrica. En la misma figura parte b) se muestra una representación gráfica de la matriz de conectividad, se pueden ver los bloques sobre la diagonal asociados con diferentes zonas de aglomeración. También se muestra que algunas partículas sólo tienen interacción con sus vecinos inmediatas mientras en otras regiones algunas partículas llegan a interactuar hasta con 18 vecinos. Este ejemplo presenta una configuración mas diversa, posibilitando cúmulos de diferentes tamaños interactuando unos con otros como si se tratara de partículas con masas considerablemente mayores a las de cada partícula individual, pero con la propiedad de retener al interior de las aglomeraciones las vibraciones de alta frecuencia.

La motivación para esta configuración es tener un conjunto de aglomeraciones de diferentes tamaños, distribuidas a lo largo de toda la cadena, determinar numéricamente la relación de dispersión y comparar con ejemplos anteriores. El resultado de la comparación se obtiene de la Figura 3.13 a) donde se observa que la banda de separación que exhiben los ejemplos anteriores, ha desaparecido. Para este caso no existen frecuencias prohibidas. La parte b) de la misma figura muestra que la localización de los modos

de vibración ocurre tanto para bajas como para altas frecuencias. Localizándose las altas en las zonas de mayor densidad y las bajas frecuencias sólo pueden hacerlo en las regiones de menor densidad de partículas.

Ejemplo: 6—D1 Cadena de partículas en una dimensión con densidad variable, alcanzando su máximo en el centro

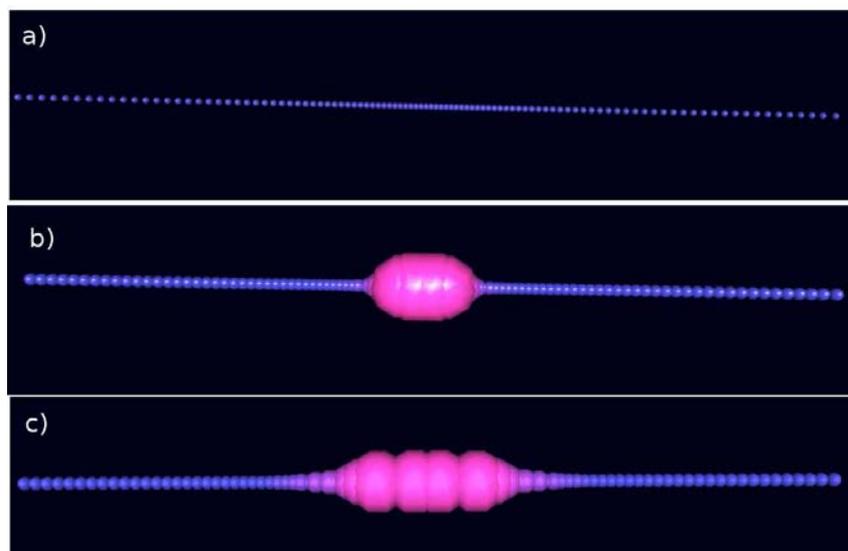


Figura 3.14: a) Cadena con cambio en la densidad de partículas, en los extremos la densidad es mínima y en el centro es máxima. b) Localización en la misma cadena del modo de vibración mas alto. c) Localización en la cadena del décimo modo más alto de vibración.

Este es un ejemplo para una cadena donde la distancia entre partículas cambia, estando mas separadas las partículas en la orilla y mas cerca en el centro. La variación en la densidad a lo largo de la cadena es suave, a diferencia de los ejemplos anteriores. Se presenta una visualización de la matriz de conectividad (2.30) en formato de imagen en la Figura 3.15. También se muestra la región de la cadena que concentra las frecuencias más altas. En este ejemplo se observa que el comportamiento espectral es diferente al de los ejemplos con regiones de aglomeración, sin embargo también se observa un comportamiento de localización de los modos altos de vibración en las zonas de mayor aglomeración exhibiendo en ese sentido un comportamiento de localización espacial semejante a los ejemplos anteriores.

En la Figura 3.14 se puede observar: a) el arreglo de partículas formando la cadena de este ejemplo. b) corresponde a la localización dentro de la cadena del modo de localización mas alto. Esto resulta interesante ya que también exhibe localización pero en una región un poco más extensa de la cadena comparada con las cadenas con aglomeraciones que tienen una localización altamente definida como son los ejemplos anteriores. c) se muestra la localización del décimo modo de vibración a lo largo de la cadena. Se puede observar que esta un poco mas extendido fuera del centro pero también dentro de la región de mayor densidad.

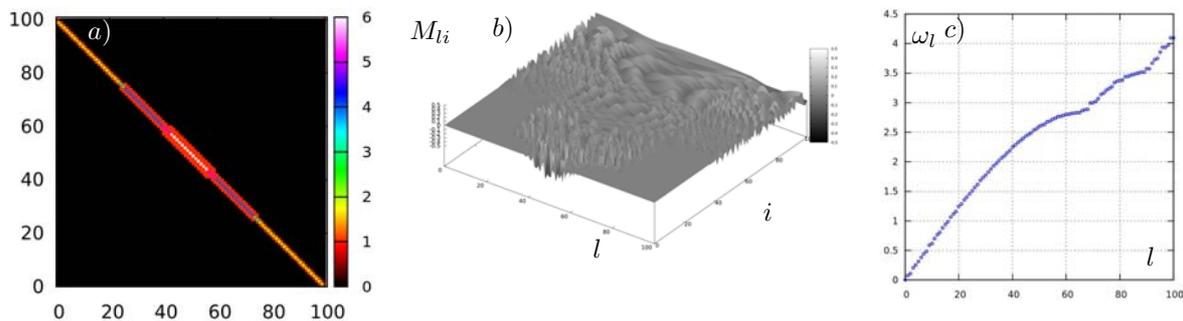


Figura 3.15: a) Imagen de la matriz de interacción. b) Imagen formada por las funciones propias de la matriz de interacción. c) Valores propios de la matriz de interacción.

En la Figura 3.15 se muestra en a) una visualización de la matriz de interacción, donde la escala de color indica el número de vecinos que tiene cada partícula. Las partículas que forman la cadena se encuentran representadas en la diagonal de la matriz de interacción como se indica en (2.26) y las partículas que están dentro de una esfera de radio R_c aparecen de un color diferente al negro y se representan con los pixeles de color fuera de la diagonal. En el inciso b) de la misma figura se representan las funciones propias, en la parte inferior de la imagen están las que corresponden a frecuencias altas y en la parte superior las que corresponden a frecuencias bajas, esta imagen deja ver la forma en que se distribuyen los modos de vibración a lo largo de la cadena, se puede notar que los modos altos de vibración se concentran en la región de mayor densidad de la cadena y al buscar modos de menor frecuencia estos pierden localización en el centro para ubicarse en zonas de densidad menor. Finalmente los modos bajos de vibración también quedan restringidos a las secciones de la cadena de menor densidad no pudiendo penetrar en regiones mas densas. Por último en la figura c) se muestra el espectro de la misma matriz, se puede observar que no exhibe las bandas de separación espectral que sí aparecía en los ejemplos anteriores. Sin embargo, si hay cambios rápidos en la tendencia de la gráfica, esencialmente hay tres comportamientos, el primero correspondiente a las bajas frecuencias, un cambio que conecta con las frecuencias medias y finalmente un cambio rápido que conecta con una tendencia en las frecuencias altas.

En resumen este ejemplo aunque tiene una distribución conformacional diferente también exhibe localización de modos. Diferentes modos de vibración se localizan en diferentes zonas de densidad, donde las ondas largas aparecen en regiones de menor densidad y las ondas cortas en las de mayor. La posibilidad de hacer variaciones en la conformación de la cadena es muy amplia.

Ejemplo: 7 — D2 Grafeno. Red bidimensional de partículas

Un ejemplo en dos dimensiones es el grafeno [49],[50], que además de ser un material real, tiene una amplia gama de aplicaciones. Su configuración atómica se ha estudiado desde hace ya algunas décadas y a lo largo de este tiempo se han caracterizado un conjunto amplio de sus propiedades (mecánicas, químicas, eléctricas y termodinámicas) [51],[52]. Este material está formado por bloques hexagonales, parecido a un panal de abeja (honeycomb). Los puentes de carbono en la mayoría de las configuraciones basadas en el carbono tienen una longitud de 1.5 \AA (Angstrom), mientras que en el grafeno tienen una longitud de

1.42 Å [53], por esta razón se le denomina como una estructura de átomos de carbono de alta densidad y pertenece a la familia de las estructuras llamadas allotropes [54], junto con el diamante, grafito y los fullerenos. En la Figura 3.16 se muestra una imagen de un arreglo estructural de unidades básicas de grafeno. Para este estudio se utilizó la estructura de grafeno obtenida de [55].

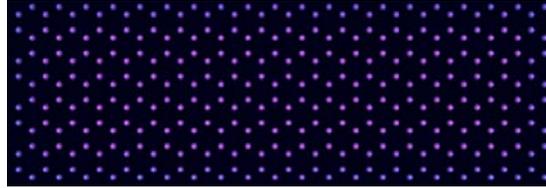


Figura 3.16: Grafeno, estructura formada por hexágonos de carbono, la longitud de los enlaces atómicos es de 1.42 Å.

Utilizando la información sobre la longitud de los puentes de carbono, se elige el parámetro de corte $R_c = 1.42$ Å, dando como resultado que cada átomo de carbono solo tiene interacción con sus tres vecinos mas cercanos como se muestra en la figura 3.17 a), en la misma figura parte b) se muestra la relación de dispersión.

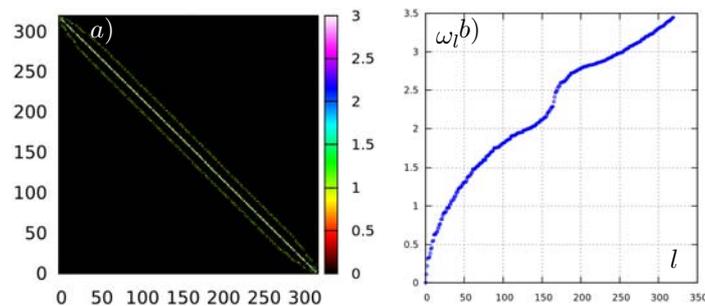


Figura 3.17: a) Matriz de conectividad para el grafeno utilizando 320 átomos, con $R_c = 1.42$ Å. b) Relación de dispersión para la misma estructura. Se puede observar que la primer mitad de los modos coincide de manera cualitativa con los modos lineales de una red homogénea.

Observación 5. En casos de configuraciones multidimensionales con simetrías bajo traslaciones multidimensionales $D > 1$ existe la posibilidad de expresar la frecuencia ω como función de más variables. El ejemplo mas sencillo es el de las mallas rectangulares con $D > 1$ dimensiones. Esta representación de ω tiene más información, por ejemplo sobre la degeneración de los valores propios de C_D .

La forma de visualizar la localización de modos para estructuras con dos o mas dimensiones, es proyectarlas sobre la propia red, de ésta forma, el tamaño de las partículas es proporcional a la energía del modo de vibración del que se desea conocer la distribución de energía sobre la red. En la Figura 3.18 se muestran tres diferentes modos de vibración, en la parte a) se muestra la localización del modo asociado a la frecuencia más baja permitida por la estructura. Se puede observar que este modo se localiza

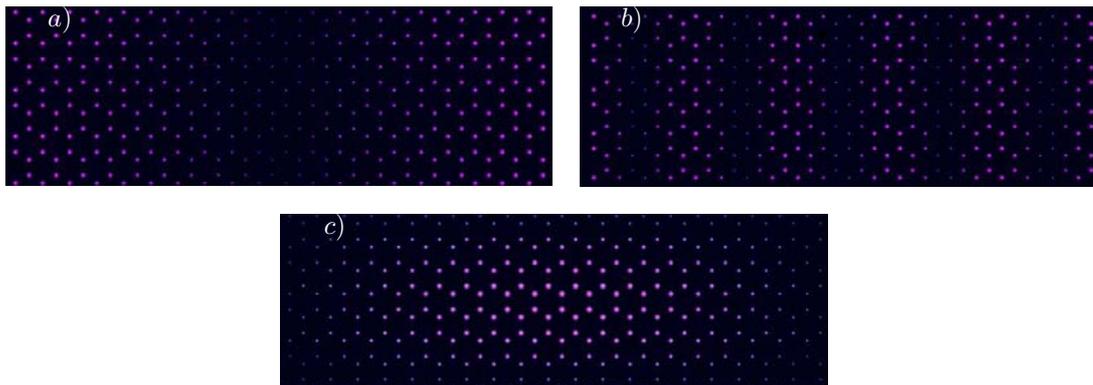


Figura 3.18: a) Localización del modo de vibración de menor frecuencia. b) Localización del modo de vibración con la décima frecuencia más baja. c) Localización del modo de vibración con la frecuencia más alta.

preferentemente en las fronteras de la estructura, la parte b) se muestra la localización para el modo asociado con la décima frecuencia mas baja, y por último en la parte c) se muestra la localización del modo mas alto permitido por la estructura. Se puede observar que este modo de vibración se localiza preferentemente en el centro de la estructura. Este mecanismo para visualizar ya había sido mostrado en el ejemplo unidimensional 6, sin embargo resulta particularmente útil para dos o tres dimensiones. Para la estructura de grafeno, se puede observar que las ondas largas se distribuyen sobre la periferia de la estructura, mientras que las ondas cortas se acumulan en las regiones centrales. En este momento solo se presenta el análisis lineal de esta estructura, sin embargo en el capítulo 5 se muestra la evolución de la energía para los distintos modos de este ejemplo, tomando en cuenta los términos no lineales.

Ejemplo: 8 — D3 Ribozima con clasificación del *Protein Data Bank* PDB300

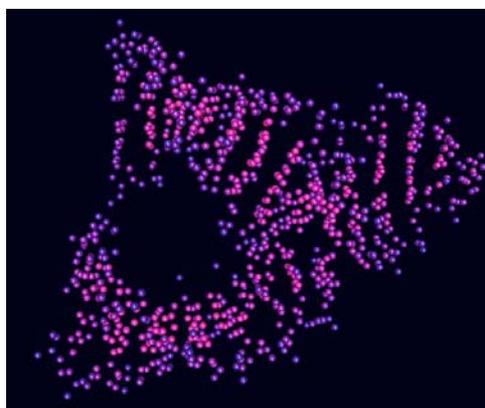


Figura 3.19: Ribozima (PDB300), es una enzima de los núcleos de ácido ribonucleico.

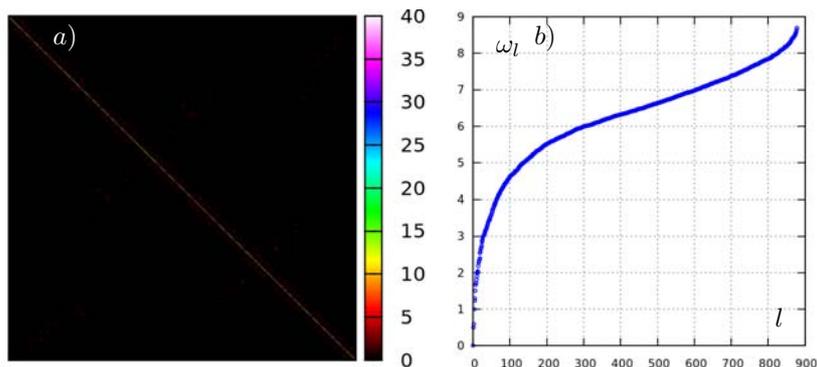


Figura 3.20: a) Matriz de conectividad para la ribozima (PDB300), se puede observar que con un radio crítico de interacción $R_c = 4.5 \text{ \AA}$, algunas partículas alcanzan hasta 40 vecinos. b) Relación de dispersión, se puede observar que alrededor de los 120 primeras frecuencias siguen la forma de una relación de dispersión lineal.

La estructura ribozima (Nombre PDB300 *Ribozime* en el catalogo PDB-DataBank [56]) que se utilizo para este ejemplo es la presentada por *William G. Scott, et al* (1996) [57], la estructura conformacional la obtuvieron mediante *Difracción de rayos X*. Las *ribozimas* son núcleos de *ácido ribonucleico* con capacidad catalítica como son las *enzimas*, es decir, ayudan a procesar reacciones químicas. Son moléculas de ácido ribonucleico que tienen la capacidad de actuar como catalizadores, están compuestas de un núcleo que se une a un sustrato. La ribozima PDB300 esta constituida por 843 átomos de los que se conoce su posición como se indica en el archivo PDB. El mismo archivo contiene mas información, como es la temperatura a la que se determinó la posición de los átomos y el tipo de solvente utilizado para realizar las medidas de difracción. Sin embargo, en este trabajo, para calcular los modos normales, sólo se utilizaron las posiciones de las partículas (átomos de carbono). Evidentemente esta *macromolécula* es un objeto en tres dimensiones, del cual se muestra la visualización en la Figura 3.19.

Diferentes autores utilizan diferentes radios críticos, dependiendo del tipo y tamaño de estructuras dentro de la proteína que se desean estudiar, pero todos los radios están entre 2.5 hasta 10 Å [8], [58]. En este trabajo el criterio para elegir el radio crítico es el radio mínimo donde cada partícula tiene al menos otra partícula vecina, esto se traduce en acotar el número de condición de la matriz de interacción (2.26). Más aún, con esta condición se cumple siempre que $\kappa(C_D) < 10^1$, donde κ determina en número de condición de la matriz C_D [59].

La matriz de interacción para la molécula Ribozima (PDB300) se muestra en la Figura 3.20 a), la relación de dispersión se muestra en la parte b) de la misma figura. Para este ejemplo se utilizó un radio de interacción $R_c = 4.5 \text{ \AA}$ obtenido mediante el criterio explicado anteriormente. Los modos en esta enzima se localizan cada uno en diferentes regiones de la misma, Así los modos de vibración asociados a las bajas frecuencias se localizan en la regiones menos densas conocidas como *exónes* [60], mientras que los modos de alta frecuencia se localizan en el centro más denso de la enzima, como se indica en la Figura 3.21. En la parte a) de esta figura se muestra el modo de vibración asociado a la frecuencia mas baja se puede ver que no tiene una localización muy definida, sin embargo suele ser más abundante en los brazos que emergen del núcleo de esta enzima. En b) se muestra el modo de vibración asociado a una frecuencia media, este modo tiene una localización en una región diferente, que corresponde a una con

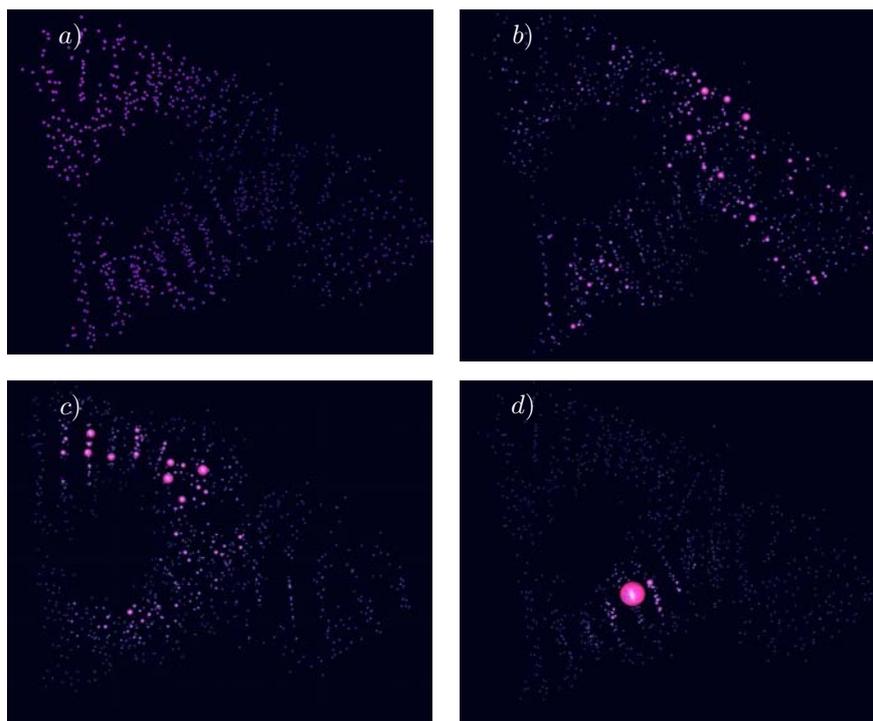


Figura 3.21: Ribozima: a) Localización del modo de vibración de menor frecuencia ω_1 . b) Localización del modo de vibración con la frecuencia 400 ω_{400} . c) Localización del modo de vibración con la frecuencia 800 ω_{800} . d) Modo de vibración con la frecuencia mas alta ω_{878} .

mayor densidad que el caso anterior. c) Este es un modo asociado a una alta frecuencia, se puede ver como se distribuye por uno de los brazos de la enzima. d) Este modo corresponde a la frecuencia mas alta, el tamaño de la esfera indica que es un modo muy localizado comparado con el resto, su posición corresponde a la región donde se une el núcleo de la enzima con uno de los brazos.

La Ribozima PDB300 es una configuración de átomos suficientemente grande como para representar la complejidad de grandes moléculas que participan en procesos bioquímicos y simultáneamente es lo suficientemente pequeña para poder hacer cálculos numéricos con ella en tiempos razonables, además de ser en si misma un catalizador muy importante para secuenciar secciones de la molécula de RNA, en algunos textos se refieren a ella como *Hammerhead*. Por otra parte, el análisis de modos normales de vibración y su distribución espacial corresponde al caso lineal, en el capítulo de integración se hace un estudio numérico mas detallado para el caso no lineal incorporando el efecto de los términos no lineales.

Ejemplo: 9 — D3 Subtilisina con clasificación del *Protein Data Bank* PDB1AV7

El siguiente ejemplo corresponde a la configuración atómica llamada subtilisina catalogada como PDB1AV7 (Subtilisin) en la base de datos PDB-Databank [56], que fue presentada por *V. S. Stoll, B. T. Eger* et al (1997) [13] obtenida del organismo *Bacillus Licheniformis*. La configuración conformacional

se obtuvo por la técnica de *Difracción de rayos X* con una resolución de 2.60 \AA . La subtilisina es una *peptidasa*, es decir una enzima que rompe los *enlaces peptídico* de las proteínas, recordando que los enlaces peptídicos esta dados por la unión de un *aminoácido* del grupo *amino* ($-\text{NH}_2$) y un *aminoácido* del grupo *carboxilo* ($-\text{COOH}$). En la Figura 3.22 parte a) se muestra una visualización de esta molécula a partir de la información del archivo (PDB). Esta enzima esta compuesta en el archivo por 1936 átomos. Esta peptidasa ya ha sido ampliamente estudiada a nivel de modos normales [14], [61], sin embargo la descripción que se hace es estadística y está expresada en términos de complejidad, entropía y temperatura. En el trabajo que aquí se presenta, sólo se calcula el espectro (relación de dispersión) como si se tratara de una red con interacciones puramente mecánicas, para ello se utilizó un radio crítico de interacción $R_c = 4.5 \text{ \AA}$.

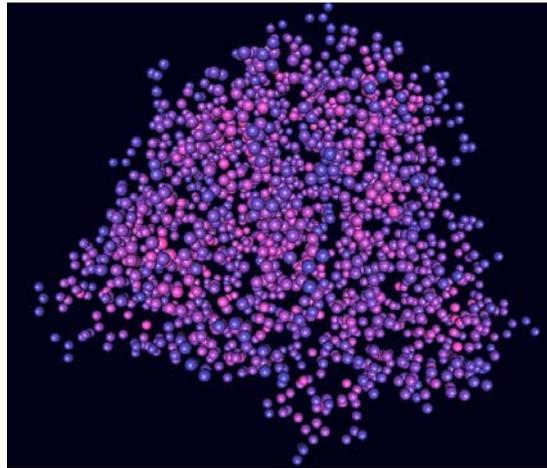


Figura 3.22: Visualización de la subtilisina (PDB1AV7). En color rosado aparecen las partículas con mas vecinas. En color azul, aparecen las partículas con menos vecinas. El radio crítico se fijo en $R_c = 4.5 \text{ \AA}$.

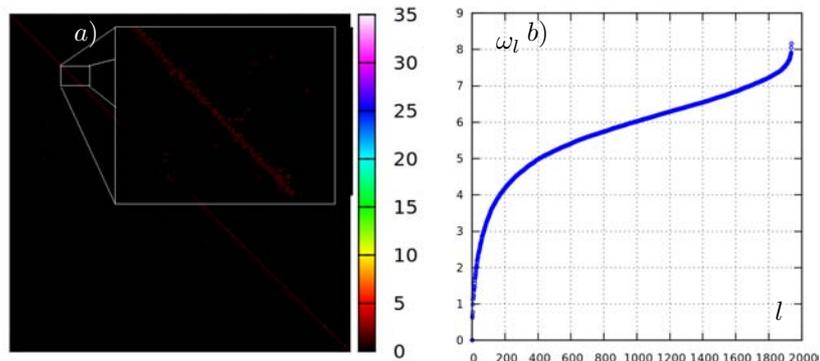


Figura 3.23: a) Matriz de interacción para la enzima subtilisina (PDB1AV7), en el recuadro se muestra una ampliación de la zona central. El radio de corte es $R_c = 4.5 \text{ \AA}$. b) Relación de dispersión.

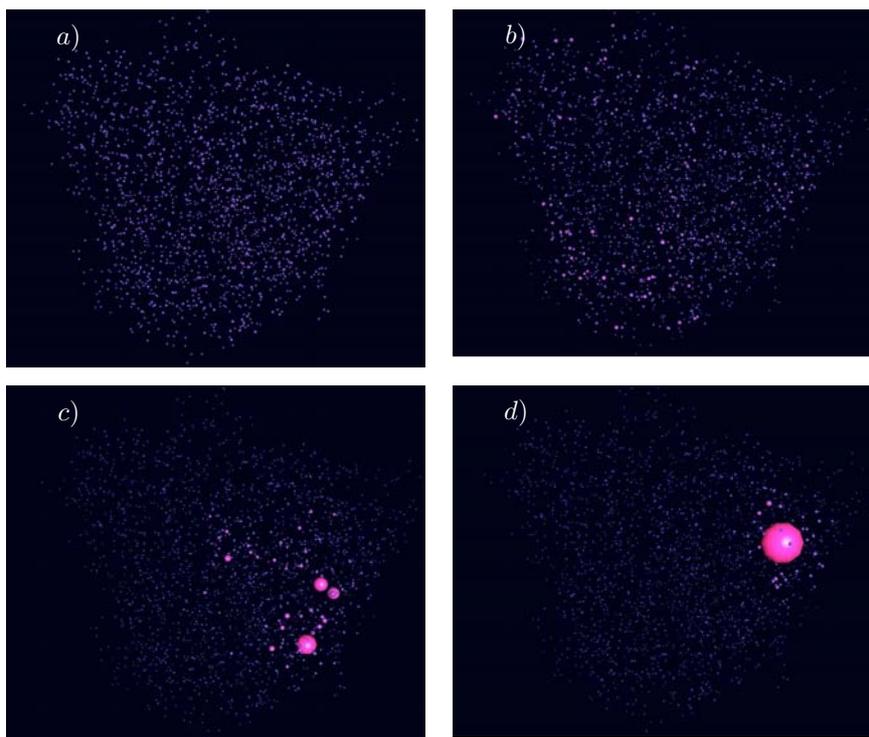


Figura 3.24: Subtilizina: a) Localización del modo de vibración de menor frecuencia ω_1 , b) Localización del modo de vibración con la 400 frecuencia ω_{950} . c) Localización del modo de vibración con la 1900 frecuencia ω_{1900} . d) Modo de vibración con la frecuencia más alta ω_{1936} .

En la Figura 3.23 en la parte a) se presenta la matriz de conectividad para PDB1AV7. En la parte b) se muestra la gráfica del número de onda l contra ω_l . La observación es que la relación de dispersión tiene la misma forma que la relación de dispersión del ejemplo 8.

La Figura 3.24 muestra la localización de cuatro diferentes modos de vibración. La parte a) corresponde al modo asociado a la frecuencia más baja, se puede observar que este modo no tiene una localización espacial particular, sino que está distribuido sobre toda la enzima. En la parte b) aparece un modo correspondiente a una de las frecuencias medias, ω_{950} , este modo tampoco muestra una localización espacial muy definida. c) Esta parte de la figura corresponde al modo asociado a la frecuencia ω_{1900} , se puede ver que este modo sí presenta localización espacial. d) Aquí se muestra la localización espacial del modo asociado a la frecuencia más alta ω_{1936} , este modo presenta una alta localización. Un aspecto interesante es averiguar el tipo de estabilidad y conocer si la subtilizina tiene alguna propiedad química en particular en esta región.

Con este ejemplo finaliza la sección para determinar matrices de conectividad, las funciones propias y el espectro de diferentes configuraciones. Se pueden tomar muchos más ejemplos de redes, ya sea de la naturaleza como son los hechos por cristalografía o pueden ser artificiales. En la siguiente sección se

presenta una herramienta matemática que permite distinguir entre dos tipos de componentes en la parte no lineal, la compuesta por monomios resonantes y la de monomios no resonantes.

Capítulo 4

Formas Normales de Birkhoff: subespacios invariantes y localización

En este capítulo se aplica la teoría de formas normales de Birkhoff [18], [62] para eliminar monomios no resonantes de la parte cuártica de la ecuación (2.83). La idea principal de este método, es mediante transformaciones canónicas cercanas de la identidad [63], encontrar una vecindad del origen donde el sistema se puede aproximar con un sistema simplificado (forma normal) módulo términos de orden superior.

El resultado principal es la construcción de una forma normal con subespacios invariantes que contiene soluciones espacialmente localizadas como se muestra en las secciones 4.2 y 4.3. Para la forma normal se encuentra una simetría ante cambios de fase global. Esta simetría tiene asociada una constante adicional de movimiento, al fijar dicha cantidad y utilizando argumentos topológicos es posible garantizar la existencia de órbitas periódicas, como se muestra en la sección 4.4. En la sección 4.4.1 se hace una búsqueda de órbitas periódicas utilizando el método del gradiente (ascenso/descenso), y por último en la sección 4.5 se determina la estabilidad lineal de las órbitas periódicas. La siguiente sección es una introducción a la teoría de formas normales.

Subrayamos que: (i) las transformaciones simplécticas que se muestran en las secciones 4.2 y 4.3 son formales, como se indica en 4.1.2, 4.3 y [64]. (ii) El argumento de la localización espacial se basa en la suposición de que ciertos modos normales del problema lineal son localizados. Esta localización es por el momento heurística y se basa en las observaciones de los experimentos numéricos del capítulo 3.

4.1. Introducción a las formas normales de Birkhoff

Muchos aspectos relevantes de los sistemas Hamiltonianos están expresados en términos de los *Paréntesis de Poisson*, para ello se hacen las siguientes definiciones: Sean $f, g : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ funciones diferenciables respecto a variables Q_i y P_i con $i = 1 \dots N$, entonces los *Paréntesis de Poisson* [65] $[f, g]$ se definen como se indica a continuación:

$$[f, g] = [\nabla f]^T \mathbb{J} \nabla g, \quad (4.1)$$

donde \mathbb{J} es la matriz *simpléctica* o de *Poisson* y esta definida como

$$\mathbb{J} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & 0 \end{pmatrix}_{2N \times 2N}. \quad (4.2)$$

El subíndice $2N \times 2N$ indica el tamaño de la matriz. Para simplificar las expresiones que vienen a continuación se utiliza la notación f_P y f_Q para representar las derivadas parciales de f , respecto a P y Q , de manera análoga se utiliza ésta notación para g , por lo tanto (4.1) se puede desarrollar como

$$\begin{aligned} [f, g] &= (f_Q f_P) \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_Q \\ g_P \end{pmatrix} \\ &= f_Q g_P - f_P g_Q = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial Q_i} \frac{\partial g}{\partial P_i} - \frac{\partial f}{\partial P_i} \frac{\partial g}{\partial Q_i} \right). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Utilizando la regla de la cadena y recordando las ecuaciones (2.67) y (2.68) que relacionan Q'_i y P'_i las cuales por simplicidad se denotaran como Q_i y P_i , con a_i y a_i^* de la subsección 2.2.2, se determinan las relaciones

$$\frac{\partial f}{\partial Q_i} = \frac{\partial f}{\partial a_i} \frac{\partial a_i}{\partial Q_i} + \frac{\partial f}{\partial a_i^*} \frac{\partial a_i^*}{\partial Q_i} = \sqrt{\frac{\omega_i}{2}} \frac{\partial f}{\partial a_i} + \sqrt{\frac{\omega_i}{2}} \frac{\partial f}{\partial a_i^*} = \sqrt{\frac{\omega_i}{2}} \left(\frac{\partial f}{\partial a_i} + \frac{\partial f}{\partial a_i^*} \right) \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial f}{\partial P_i} = \frac{\partial f}{\partial a_i} \frac{\partial a_i}{\partial P_i} + \frac{\partial f}{\partial a_i^*} \frac{\partial a_i^*}{\partial P_i} = \frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} \frac{\partial f}{\partial a_i} - \frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} \frac{\partial f}{\partial a_i^*} = \frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} \left(\frac{\partial f}{\partial a_i} - \frac{\partial f}{\partial a_i^*} \right) \quad (4.5)$$

de manera idéntica se calculan las derivadas parciales para g . Simplificando la notación, en esta sección, las coordenadas son representadas con un sólo subíndice.

Sustituyendo las ecuaciones (4.4) y (4.5) en la ecuación (4.3) se obtiene

$$\begin{aligned} [f, g] &= \sum_{i=1}^N \left(\sqrt{\frac{\omega_i}{2}} \left(\frac{\partial f}{\partial a_i} + \frac{\partial f}{\partial a_i^*} \right) \frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} \left(\frac{\partial g}{\partial a_i} - \frac{\partial g}{\partial a_i^*} \right) - \frac{i}{\sqrt{2\omega_i}} \left(\frac{\partial f}{\partial a_i} - \frac{\partial f}{\partial a_i^*} \right) \sqrt{\frac{\omega_i}{2}} \left(\frac{\partial g}{\partial a_i} + \frac{\partial g}{\partial a_i^*} \right) \right) \\ &= i \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial a_i^*} \frac{\partial g}{\partial a_i} - \frac{\partial f}{\partial a_i} \frac{\partial g}{\partial a_i^*} \right), \end{aligned} \quad (4.6)$$

que representan el *Parentesis de Poisson* respecto a los modos normales a y a^* .

Si de manera particular se aplica el último resultado (4.6) para el caso \mathcal{H}_2 definido en (2.73) y un monomio \mathcal{M} extraído de la parte cuártica de la ecuación (2.83) [21], es decir, evaluar el *paréntesis de Poisson*. Sea \mathcal{M} un monomio de la parte cuártica de del Hamiltoniano \mathcal{H} de (2.83) con $k_1 + \dots + \bar{k}_n = 4$, que tiene la forma

$$\mathcal{M} = a_1^{k_1} a_2^{k_2} \dots a_n^{*\bar{k}_n} \quad (4.7)$$

por lo tanto, el paréntesis de Poisson de \mathcal{H}_2 y \mathcal{M} queda expresado, de acuerdo con (4.6), en la forma

$$[\mathcal{H}_2, \mathcal{M}] = \left[i \sum_i \omega_i a_i a_i^*, \mathcal{M} \right] = i \sum_i \omega_i [a_i a_i^*, \mathcal{M}] \quad (4.8)$$

$$= i \sum_i \omega_i \left(\sum_j \left(\frac{\partial}{\partial a_j^*} a_i a_i^* \frac{\partial}{\partial a_j} \mathcal{M} - \frac{\partial}{\partial a_j} a_i a_i^* \frac{\partial}{\partial a_j^*} \mathcal{M} \right) \right). \quad (4.9)$$

Entonces

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_2, \mathcal{M}] &= i \sum_i \omega_i (\mathbf{k}_i \mathcal{M} - \bar{\mathbf{k}}_i \mathcal{M}), \\
&= [i \sum_i \omega_i (\mathbf{k}_i - \bar{\mathbf{k}}_i)] \mathcal{M}, \\
&= [i \sum_i \omega_i (\mathbf{k}_i - \bar{\mathbf{k}}_i)] a_1^{k_1} a_2^{k_2} \dots a_n^{\bar{k}_n}.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

La ecuación (4.10) es válida para \mathcal{M} un monomio arbitrario, es decir, los índices $k_1, k_2 \dots \bar{k}_n$ enteros no negativos arbitrarios.

4.1.1. Transformaciones simplécticas

A manera de introducción para esta subsección, se analiza primero las dos propiedades básicas de las transformaciones *simplécticas* [66], [67]:

1. Las transformaciones *simplécticas* preservan la estructura Hamiltoniana, es decir, no cambia la forma de las ecuaciones de Hamilton.
2. Los flujos de campos vectoriales Hamiltonianos generan transformaciones *simplécticas*.

Partiendo de la propiedad 2, se define una transformación $\phi_t : \mathbb{R}^{2N} \rightarrow \mathbb{R}^{2N}$ dada por el flujo de un sistema *Hamiltoniano* de N grados de libertad, las ecuaciones de movimiento para este sistema se representan

$$\dot{z} = \mathbb{J} \nabla \mathcal{H}(z). \tag{4.11}$$

Como ϕ_t es el flujo de la solución, a lo largo del tiempo, se debe satisfacer lo siguiente:

$$\frac{d}{dt} \phi_t(z_0) = \mathbb{J} \nabla \mathcal{H}(\phi_t(z_0)), \quad \text{con condición inicial } \phi_0 = z_0 \tag{4.12}$$

y $\phi_t(z)$ satisface la condición de simplecticidad [18], por lo tanto

$$[D\phi_t(z_0)]^T \mathbb{J} [D\phi_t(z_0)] = \mathbb{J}. \tag{4.13}$$

Sea f_1 un *simplectomorfismo*, es decir, un difeomorfismo sobre la variedad simpléctica definida por el flujo del Hamiltoniano que preserve la forma simpléctica, i.e. satisface $Df_1 \mathbb{J} Df_1^T = \mathbb{J}$.
Sea

$$z = f_1(w) \tag{4.14}$$

donde w es un nuevo conjunto de variables, con lo que se expresa el Hamiltoniano en términos de w

$$\mathcal{H}(z) = \mathcal{H}(f_1(w)) = (\mathcal{H} \circ f_1)(w). \tag{4.15}$$

Lo que se desea es construir f_1 , para ello se define un parámetro s , que juega un papel de *pseudotiempo*, con lo que se satisface la ecuación de movimiento en las variables w

$$\frac{d}{ds} w(s) = \mathbb{J} \nabla \mathcal{S}(w(s)), \tag{4.16}$$

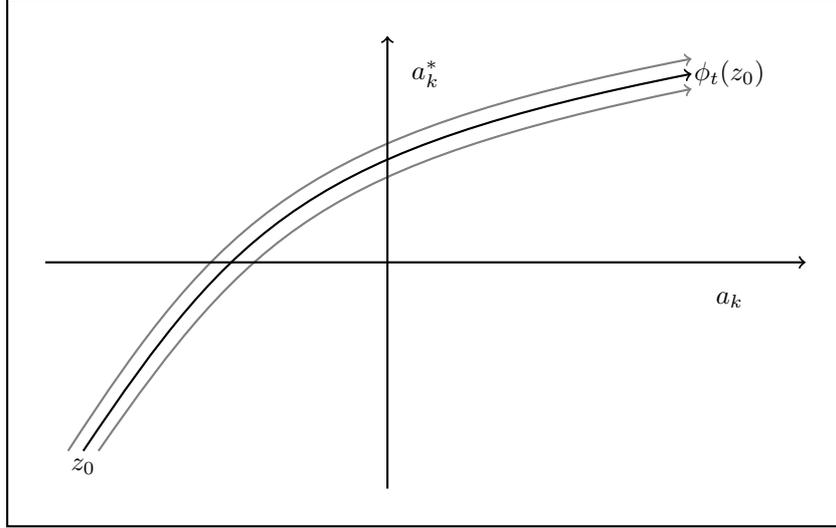


Figura 4.1: Esquema de transformación simpléctica mediante el flujo de la solución $\phi_t(z_0)$.

con la propiedad que $w(0) = w$ y $w(1) = f_1(w)$. Así, f_1 tiene el papel de mapeo de tiempo 1 para el flujo Hamiltoniano de \mathcal{S} . La primera parte del método consiste en encontrar \mathcal{S} y a partir de ahí obtener el flujo f_1 . Con la siguiente relación, se puede integrar respecto al parámetro s en el intervalo $[0, 1]$, con lo que tiene:

$$\mathcal{H}(z) = \mathcal{H}(f_s(w)) = (\mathcal{H} \circ f_s)(w), \quad (4.17)$$

para ello se analizan las relaciones siguientes

$$\mathcal{H}(f_1(w)) = (\mathcal{H} \circ f_1)(w), \quad \mathcal{H}(f_s(w)) = (\mathcal{H} \circ f_s)(w),$$

de donde

$$\frac{d}{ds}(\mathcal{H} \circ f_s)(w) = \frac{d}{ds}\mathcal{H}(f_s(w)) = \frac{d}{ds}\mathcal{H}(w(s)).$$

Utilizando la notación $w(s) = f_s(w)$, se tiene

$$\frac{d}{ds}(\mathcal{H} \circ f_s)(w) = [\nabla\mathcal{H}(w(s))]^T \frac{dw(s)}{ds} = [\nabla\mathcal{H}(w(s))]^T \mathbb{J}\nabla\mathcal{S}(w(s)),$$

que es precisamente la definición de corchete de *Poisson* (4.1), por lo tanto

$$\frac{d}{ds}\mathcal{H}(w(s)) = [\mathcal{H}, \mathcal{S}](w(s)). \quad (4.18)$$

Para las derivadas de orden superior también se puede hacer un análisis semejante, de donde se obtiene para el caso general

$$\frac{d^n}{ds^n} \mathcal{H}(w(s)) = \frac{d}{ds} \underbrace{[\dots [\mathcal{H}, \mathcal{S}], \mathcal{S} \dots \mathcal{S}]}_{n \text{ veces}} w(s) = \underbrace{[\nabla [\dots [\mathcal{H}, \mathcal{S}], \mathcal{S} \dots \mathcal{S}]]^T}_{n \text{ veces}} \mathbb{J} \nabla \mathcal{S} w(s), \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.19)$$

Al mismo tiempo, haciendo una expansión en *Taylor* del Hamiltoniano $\mathcal{H}(w(\epsilon))$ alrededor del punto $\epsilon = 0$, se tiene

$$\mathcal{H}(w(\epsilon)) = \mathcal{H}(w(\epsilon)) \Big|_{\epsilon=0} + \epsilon \frac{d}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} \mathcal{H}(w(\epsilon)) + \frac{1}{2} \epsilon^2 \frac{d^2}{d\epsilon^2} \Big|_{\epsilon=0} \mathcal{H}(w(\epsilon)) + \frac{1}{3!} \epsilon^3 \frac{d^3}{d\epsilon^3} \Big|_{\epsilon=0} \mathcal{H}(w(\epsilon)) + \dots \quad (4.20)$$

Sustituyendo las relaciones entre las derivadas y los corchetes de *Poisson* (4.18)-(4.19) en la ecuación (4.20), se tiene

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(w(\epsilon)) &= \mathcal{H}(w(\epsilon)) \Big|_{\epsilon=0} + \epsilon [\mathcal{H}, \mathcal{S}] \Big|_{\epsilon=0} (w(\epsilon)) + \frac{1}{2} \epsilon^2 [[\mathcal{H}, \mathcal{S}], \mathcal{S}] \Big|_{\epsilon=0} w(\epsilon) \\ &+ \frac{1}{3!} \epsilon^3 [[[\mathcal{H}, \mathcal{S}], \mathcal{S}], \mathcal{S}] \Big|_{\epsilon=0} w(\epsilon) + \dots \end{aligned} \quad (4.21)$$

Suponiendo que la serie de (4.21) es convergente para $\epsilon \in [0, 1]$ se tiene

$$\mathcal{H}(w(\epsilon)) \Big|_{\epsilon=1} = \mathcal{H}(w(1)) = \mathcal{H}(f_1(w)) = \mathcal{H}(z), \quad (4.22)$$

con

$$\mathcal{H}(z) = \mathcal{H}(w) + [\mathcal{H}, \mathcal{S}](w) + \frac{1}{2} [[\mathcal{H}, \mathcal{S}], \mathcal{S}](w) + \frac{1}{3!} [[[\mathcal{H}, \mathcal{S}], \mathcal{S}], \mathcal{S}](w) + \dots \quad (4.23)$$

La expresión (4.23) muestra explícitamente el Hamiltoniano $H(z)$ ahora en la variable w relacionadas mediante $f_1(w) = z$, bajo la suposición que f_1 es el mapeo de tiempo-1 de (4.16) y que por lo tanto, f_1 es un simplectomorfismo. Sin embargo, la ecuación (4.23) es una expresión formal, en particular su validez depende de la convergencia de las series infinitas, este aspecto se discute al final de la presente sección.

Para continuar, se hace la suposición de que el Hamiltoniano (4.23) esta compuesto por

$$\mathcal{H}(z) = \underbrace{\mathcal{H}_2(z)}_{\text{cuadráticos}} + \epsilon \underbrace{\mathcal{H}_3(z)}_{\text{cúbicos}} + \frac{\epsilon^2}{2!} \underbrace{\mathcal{H}_4(z)}_{\text{cuárticos}} + \frac{\epsilon^3}{3!} \underbrace{\mathcal{H}_5(z)}_{\text{quintos}} + \underbrace{O(\epsilon^6)}_{\text{superiores}}. \quad (4.24)$$

Ademas se propone $\mathcal{S} = \epsilon\chi$, entonces de (4.23) se tiene

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(z) &= \mathcal{H}_2(w) + \epsilon \mathcal{H}_3(w) + \frac{\epsilon^2}{2!} \mathcal{H}_4(w) + O(\epsilon^5) + [\mathcal{H}_2 + \epsilon \mathcal{H}_3 + \frac{\epsilon^2}{2!} \mathcal{H}_4 + O(\epsilon^5), \epsilon\chi](w) \\ &+ [[\mathcal{H}_2 + \epsilon \mathcal{H}_3 + \frac{\epsilon^2}{2!} \mathcal{H}_4 + O(\epsilon^5), \epsilon\chi], \epsilon\chi] w + O(\epsilon^5). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Como el paréntesis de *Poisson* es un operador lineal, se distribuye sobre los argumentos, se factoriza el parámetro ϵ y se agrupan los términos por potencias, entonces

$$\mathcal{H}(z) = \epsilon \{ \mathcal{H}_3(w) + [\mathcal{H}_2, \chi](w) \} + \frac{\epsilon^2}{2!} \{ \mathcal{H}_4(w) + [\mathcal{H}_3, \chi](w) + [[\mathcal{H}_2, \chi](w)], \chi](w) \} + O(\epsilon^5). \quad (4.26)$$

Por ejemplo para eliminar la parte cúbica del lado izquierdo de (4.26) es suficiente escoger χ tal que se satisfice

$$[\mathcal{H}_2, \chi](w) + \mathcal{H}_3(w) = 0, . \quad (4.27)$$

la cual es llamada función Homológica.

Es inmediato comprobar que χ tiene que ser cúbica. Respecto a la convergencia, usando $\mathcal{S} = \epsilon\chi$ y que \mathcal{H} es analítica, se puede justificar para $|\epsilon|$ suficientemente pequeño [21] que la convergencia de la serie (4.23) es equivalente a la convergencia de (4.20). Es decir, la convergencia de (4.20) para $|\epsilon|$ suficientemente pequeño, sugiere la existencia de soluciones analíticas en tiempo de EDO [27], [29] y [40], se puede mostrar para χ analítica real.

4.1.2. Forma normal de Birkhoff y resonancias

El Hamiltoniano de la ecuación (2.83) se puede expresar como (4.28), utilizando la notación $a = (a_{11}, a_{21}, \dots, a_{ND})$ y definiendo las variables $z = (\tilde{a}, \tilde{a}^*)$ como las variables originales. Con esta notación se tiene

$$\mathcal{H}(z) = \mathcal{H}_2(z) + \mathcal{H}_4(z). \quad (4.28)$$

Definiendo $w = (a, a^*)$ como las nuevas variables y a \mathcal{S} como la suma de los monomios de cuarto grado de (4.23), es decir

$$\mathcal{S} = \sum_{\mathcal{M} \in \mathcal{J}} \mathcal{S}_{\mathcal{M}} \quad (4.29)$$

donde \mathcal{J} es el conjunto de monomios que podemos y queremos eliminar. Utilizando nuevamente (4.23) se tiene

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(z) &= \mathcal{H}(w) + [\mathcal{H}, \mathcal{S}](w) + \text{O}(6) \\ &= \mathcal{H}_2(w) + [\mathcal{H}_2, \mathcal{S}](w) + \mathcal{H}_4(w) + \text{O}(6) \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$= \mathcal{H}_2(w) + \tilde{\mathcal{H}}_4(w) + \text{O}(6), \quad (4.31)$$

donde

$$\tilde{\mathcal{H}}_4 = \mathcal{H}_4 - \{\text{suma de monomios en el rango de } [\mathcal{H}_2, \mathcal{S}]\}. \quad (4.32)$$

Se define también

$$\bar{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_2 + \tilde{\mathcal{H}}_4. \quad (4.33)$$

Para construir $\tilde{\mathcal{H}}_4$ deben ser eliminados algunos monomios de \mathcal{H}_4 , por lo que se plantea lo siguiente: Como \mathcal{M} es un monomio de \mathcal{H}_4 , y utilizando los resultados de la sección 4.1.1 es posible garantizar la existencia de un monomio $\mathcal{S}_{\mathcal{M}}$, tal que se cumple la condición

$$[\mathcal{H}_2, \mathcal{S}_{\mathcal{M}}] + \mathcal{M} = 0. \quad (4.34)$$

Se puede observar que al ser \mathcal{M} monomio de \mathcal{H}_4 , $\mathcal{M} = \Gamma_{k_1 k_2 k_3 k_4} b_{k_1} b_{k_2} b_{k_3} b_{k_4}$, donde b_{k_i} puede ser a_{k_i} o $a_{k_i}^*$, como un paso intermedio, de las ecuaciones (4.10) y (4.18)

$$[\mathcal{H}_2, \mathcal{M}] = \sum_i^4 \sigma(k_i) \omega_{k_i} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4} b_{k_1} b_{k_2} b_{k_3} b_{k_4},$$

por lo tanto, $\mathcal{S}_{\mathcal{M}}$ es de la forma

$$\mathcal{S}_{\mathcal{M}} = i \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4} \frac{b_{k_1} b_{k_2} b_{k_3} b_{k_4}}{\sum_i^4 \sigma(k_i) \omega_{k_i}}. \quad (4.35)$$

Tabla 4.1: Condiciones de resonancia para los monomios de \mathcal{H}_4 . Los términos resonantes no pueden ser eliminados. El estudio corresponde a la cadena unidimensional $d = 1$ del ejemplo 2 del capítulo 3.

Caso	Monomios en \mathcal{H}_4	Condición de resonancia
(1)	$a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3} a_{l_4}$	$\omega_{l_1} + \omega_{l_2} + \omega_{l_3} + \omega_{l_4} = 0.$
(2)	$a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3} a_{l_4}^*$	$\omega_{l_1} + \omega_{l_2} + \omega_{l_3} - \omega_{l_4} = 0.$
(3)	$a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3}^* a_{l_4}^*$	$\omega_{l_1} + \omega_{l_2} - \omega_{l_3} - \omega_{l_4} = 0.$
(4)	$a_{l_1} a_{l_2}^* a_{l_3}^* a_{l_4}^*$	$\omega_{l_1} - \omega_{l_2} - \omega_{l_3} - \omega_{l_4} = 0.$
(5)	$a_{l_1}^* a_{l_2}^* a_{l_3}^* a_{l_4}^*$	$-\omega_{l_1} - \omega_{l_2} - \omega_{l_3} - \omega_{l_4} = 0.$

La notación representa $\sigma(k_i) = 1$ si $b_{k_i} = a_{k_i}$ y $\sigma(k_i) = -1$ si $b_{k_i} = a_{k_i}^*$.

Consecuencia de la linealidad del paréntesis de Poisson, para eliminar una suma $\sum_j \mathcal{M}_j$ de polinomios, se puede usar $\mathcal{S} = \sum_j \mathcal{M}_j$. Así, la única restricción para $\mathcal{S}_{\mathcal{M}}$ esta sobre el denominador. Usando la nomenclatura

$$\sum_i^4 \sigma(k_i) \omega_{k_i} \neq 0 \Rightarrow \mathcal{M} \text{ no resonante,} \quad (4.36)$$

$$\sum_i^4 \sigma(k_i) \omega_{k_i} = 0 \Rightarrow \mathcal{M} \text{ resonante,} \quad (4.37)$$

para distinguir dos tipos de monomios.

Los monomios no resonantes son los que podrán ser removidos del sistema Hamiltoniano \mathcal{H} mediante transformaciones simplécticas cercanas a la identidad. Sin embargo, el radio de convergencia para la serie (4.23) depende del tamaño de los coeficientes $\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4} / \sum_i^4 \sigma(k_i) \omega_{k_i}$, en particular dicho radio decrece cuando los factores $\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4} / \sum_i^4 \sigma(k_i) \omega_{k_i}$ crecen, ver [27], [29] y [64].

4.2. Subespacios invariantes: caso con banda de separación (gap)

El análisis de las condiciones de resonancia depende de la configuración específica de cada red que se desea estudiar, es decir, se debe hacer uso de las observaciones numéricas para diferentes configuraciones.

En el conjunto de ejemplos del capítulo 3 se puede hacer una distinción en dos grupos, los que tienen espectro que cambia suavemente y los que presentan un cambio súbito. En particular el ejemplo 2 (una cadena unidimensional $d = 1$ con una región de aglomeración) presenta esta banda de separación espectral, esto abre la posibilidad de etiquetar las regiones separadas por la banda. Así, los modos correspondientes a la parte baja del espectro son representados por \mathcal{I}_- y por \mathcal{I}_+ los correspondientes a la parte alta. Se utiliza la notación ω para las frecuencias asociadas con modos en \mathcal{I}_- y Ω a las asociadas con modos en \mathcal{I}_+ (como se muestra en la figura 4.2). Este hecho motiva el siguiente conjunto de suposiciones:

1. Existe una banda de separación que divide el espectro en dos regiones como se observa en la figura 4.2. Los modos tienen índices $i \in \mathcal{I}$, la parte baja del espectro la forman los modos ω con índices en \mathcal{I}_- y la parte alta los modos Ω que tienen índices en \mathcal{I}_+ , de tal manera que $\mathcal{I} = \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_+$ y $\mathcal{I}_- \cap \mathcal{I}_+ = \emptyset$. La $\dim\{\mathcal{I}_+\} = N_1$ y la $\dim\{\mathcal{I}_-\} = N_2$.

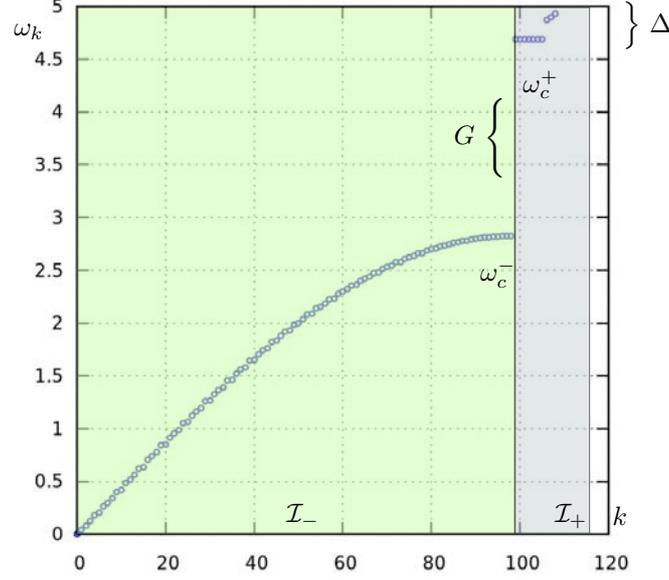


Figura 4.2: Relación de dispersión para una cadena unidimensional con una región de aglomeración. Se muestran las dos regiones del espectro \mathcal{I}_- del lado izquierdo y \mathcal{I}_+ del lado derecho.

2. Se definen las frecuencias de los extremos como

$$\omega_c = \max_{i \in \mathcal{I}_-} \{\omega_i\}, \quad \Omega_c = \min_{i \in \mathcal{I}_+} \{\Omega_i\}. \quad (4.38)$$

3. Se define el tamaño del gap como

$$G = \omega_c - \Omega_c. \quad (4.39)$$

4. Se define $\Delta = \max_{j, k \in \mathcal{I}_+} |\Omega_j - \Omega_k|$.

5. Se supone que $G - \Delta \approx G \approx O(1)$. Aquí $O(1)$ significa independiente de $\omega_2 \in \mathcal{I}_-$ que es el parámetro pequeño natural y esta relacionado con el tamaño de la red.

Observación 6. La notación $O(1)$ requiere un parámetro pequeño para cada configuración de partículas. De manera heurística, el parámetro pequeño es la más pequeña de las frecuencias, en este caso, ω_2 . Sin embargo, $O(1)$, significa que esta cantidad permanece constante, independientemente del tamaño de la cadena, dependiendo únicamente del radio crítico de interacción R_c entre partículas.

Proposición 12. Con el cambio simpléctico de variables $a = f(\tilde{a})$, donde $a = \tilde{a} + \{\text{términos cúbicos}\}$, y $a = (a_2, \dots, a_N)$, $\tilde{a} = (\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N)$ (donde \tilde{a} son las variables originales), que es generado por \mathcal{S} , como se indica en (4.29), tal que \mathcal{S} es una suma de monomios $\mathcal{S}_{\mathcal{M}}$ con la forma (4.35) que cumplen con $\sum_{i=1}^4 \sigma(k_i) \omega_{k_i} \geq O(1)$, entonces se satisface:

- i. El subespacio V_+ definido por $\tilde{a}_j = 0, \forall j \in \mathcal{I}_-$, es invariante bajo el el flujo Hamiltoniano de la parte cuártica de la forma normal \mathcal{H} de (4.33), y

II. La parte cuártica de $\bar{\mathcal{H}}(\tilde{a})$, restringida a V_+ , es invariante bajo la acción $\tilde{a}_j \mapsto \tilde{a}_j e^{i\phi}$, $\forall j \in \mathcal{I}_+$, $\phi \in \mathbb{R}$.

Demostración 12. Para la parte I) de la proposición (12) se utilizan las ecuaciones de movimiento \dot{a}_k , $k \in \mathcal{I}_-$ obtenidas del Hamiltoniano (2.83).

De esta forma,

$$\begin{aligned}
\dot{a}_k = & -i\omega_k a_k - i\frac{k_4}{4} \left\{ \sum_{k_1, k_2, k_3=2}^N \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} \left(4a_{k_1} a_{k_2} a_{k_3} + 6a_{k_1} a_{k_2} a_{k_3}^* + 4a_{k_1} a_{k_2}^* a_{k_3}^* \right) \right. \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_4=2}^N \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} \left(6a_{k_1} a_{k_2} a_{k_4}^* + 4a_{k_1} a_{k_2}^* a_{k_4}^* \right) + \sum_{k_1, k_3, k_4=2}^N \tilde{\Gamma}_{k_1 k k_3 k_4} \left(4a_{k_1} a_{k_3}^* a_{k_4}^* \right) \\
& + \left. \sum_{k_2, k_3, k_4=2}^N \tilde{\Gamma}_{k k_2 k_3 k_4} \left(4a_{k_2}^* a_{k_3}^* a_{k_4}^* \right) \right\} \\
& - i\frac{k_4}{4} \sum_{d_1=1}^D \left\{ \sum_{k_1 k_2 k_3=2}^N \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} \left(4a_{k_1} a_{k_2} a_{k_3} + 6a_{k_1} a_{k_2} a_{k_3}^* + 4a_{k_1} a_{k_2}^* a_{k_3}^* \right) \right. \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_4=2}^N \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} \left(6a_{k_1} a_{k_2} a_{k_4}^* + 4a_{k_1} a_{k_2}^* a_{k_4}^* \right) + \sum_{k_1 k_3 k_4=2}^N \tilde{\Gamma}_{k_1 k k_3 k_4} \left(4a_{k_1} a_{k_3}^* a_{k_4}^* \right) \\
& + \left. \sum_{k_2, k_3, k_4=2}^N \tilde{\Gamma}_{k k_2 k_3 k_4} \left(4a_{k_2}^* a_{k_3}^* a_{k_4}^* \right) \right\}.
\end{aligned}$$

Compactando la notación mediante la definición del factor $T_{d_1 d_2}^d$

$$T_{d_1 d_2}^d = (\delta_{d_2 d} + \delta_{d_1 d}), \quad (4.40)$$

donde $\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$ y $\delta_{ij} = 1$ si $i = j$. Así,

$$\begin{aligned}
\dot{a}_k = & -i\omega_k a_k - i\frac{k_4}{4} \sum_{d_1, d_2=1}^D T_{d_1 d_2}^d \left\{ \sum_{k_1, k_2, k_3=2}^N \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} \left(4a_{k_1} a_{k_2} a_{k_3} + 6a_{k_1} a_{k_2} a_{k_3}^* + 4a_{k_1} a_{k_2}^* a_{k_3}^* \right) \right. \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_4=2}^N \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} \left(6a_{k_1} a_{k_2} a_{k_4}^* + 4a_{k_1} a_{k_2}^* a_{k_4}^* \right) + \sum_{k_1, k_3, k_4=2}^N \tilde{\Gamma}_{k_1 k k_3 k_4} \left(4a_{k_1} a_{k_3}^* a_{k_4}^* \right) \\
& + \left. \sum_{k_2, k_3, k_4=2}^N \tilde{\Gamma}_{k k_2 k_3 k_4} \left(4a_{k_2}^* a_{k_3}^* a_{k_4}^* \right) \right\}. \quad (4.41)
\end{aligned}$$

La evolución de los modos a_k con $k \in \mathcal{I}_-$, esta determinada por la ecuación (4.41). Observando que la única manera para que un modo en \mathcal{I}_- con condición inicial $a_k = 0$, sea forzado, es que en la ecuación (4.41) existan monomios que son productos de tres amplitudes a_j y/o a_j^* con $j \in \mathcal{I}_+$, de tal manera que logran activar al modo a_k con $l \in \mathcal{I}_-$. Por lo tanto, expresando (4.41) para $l \in \mathcal{I}_-$ en forma esquemática

$$\dot{a}_k = -i\omega_k a_k + M_+ + M_{+/-}, \quad l \in \mathcal{I}_-, \quad (4.42)$$

Tabla 4.2: Monomios en la ecuación de movimiento (4.42) y su origen en el Hamiltoniano (2.83).

Caso	Monomio en \dot{a}_k , $k \in \mathcal{I}_-$, $d \in [1, D]$ $l_1, l_2, l_3 \in \mathcal{I}_+$	Monomio en la parte cuártica del Hamiltoniano
(1)	$a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3}$	$a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3} a_{l_4}^*$
(2)	$a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3}^*$	$a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3}^* a_l^*$
(3)	$a_{l_1} a_{l_2}^* a_{l_3}^*$	$a_{l_1} a_{l_2}^* a_{l_3}^* a_l^*$
(4)	$a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3}^*$	$a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3}^* a_{l_4}^*$
(5)	$a_{l_1} a_{l_2}^* a_{l_3}^*$	$a_{l_1} a_{l_2}^* a_{l_3}^* a_{l_4}^*$
(6)	$a_{l_1} a_{l_3}^* a_{l_2}^*$	$a_{l_1} a_{l_3}^* a_{l_2}^* a_{l_4}^*$

Tabla 4.3: Suma de las frecuencias para los monomios cuárticos en (2.83), con grado tres en las variables a_k , a_k^* , $k \in \mathcal{I}_-$ y de grado 1 en las variables a_{l_j} y $a_{l_j}^*$, $l \in \mathcal{I}_+$.

Caso	denominador
(1)	$\Omega_{l_1} + \Omega_{l_2} + \Omega_{l_3} - \tilde{\omega}_{l_4} \geq \Omega_c + G > O(1)$
(2)	$\Omega_{l_1} + \Omega_{l_2} - \Omega_{l_3} - \tilde{\omega}_{l_4} \geq G + \Delta > O(1)$
(3)	$\Omega_{l_1} - \Omega_{l_2} - \Omega_{l_3} - \tilde{\omega}_{l_4} \geq G - \Delta > O(1)$
(4)	$\Omega_{l_1} + \Omega_{l_2} - \tilde{\omega}_{l_3} - \Omega_{l_4} \geq G - \Delta > O(1)$
(5)	$ \Omega_{l_1} - \Omega_{l_2} - \tilde{\omega}_{l_3} - \Omega_{l_4} \geq G - \Delta \geq O(1)$
(6)	$ \Omega_{l_1} - \tilde{\omega}_{l_2} - \Omega_{l_3} - \Omega_{l_4} \geq G - \Delta \geq O(1)$

con M_+ la suma de monomios, cada uno con la forma $b_{k_1} b_{k_2} b_{k_3}$ donde $b_{k_j} = a_{k_j}$ o $a_{k_j}^*$ con $k_j \in \mathcal{I}_+$ y $M_{+/-}$ productos de monomios que combinan índices de \mathcal{I}_+ y \mathcal{I}_- . Lo que se desea es eliminar los monomios en M_+ , de tal manera que no ocurre esta activación, para ello se recurre a las condiciones de resonancia como se muestra a continuación.

Para analizar si es posible o no la activación del modo a_k con $k \in \mathcal{I}_-$, se construye la tabla 4.2 que muestra en la primer columna los monomios pertenecientes a M_+ de la ecuación (4.42), y su correspondiente monomio en el Hamiltoniano de la ecuación (4.31). En la tabla 4.3 se muestra la correspondiente condición de resonancia. Se puede observar en la misma tabla que la suma de las frecuencias asociadas a cada monomio del Hamiltoniano siempre es de orden $O(1)$. Para distinguir las frecuencias asociadas a modos en \mathcal{I}_+ o \mathcal{I}_- se utiliza Ω_l para $l \in \mathcal{I}_+$ y ω_k para $l, k \in \mathcal{I}_-$, como se muestra en la tabla 4.3. De donde se concluye que no hay resonancias entre los modos a_k con $k \in \mathcal{I}_-$ y modos a_l con $l \in \mathcal{I}_+$, y por lo tanto estos monomios fueron eliminados previamente de \mathcal{H} vía symplectomorfismos.

Con el análisis de las tablas 4.2 y 4.3 se puede concluir que al fijar $a_k = 0$ con $k \in \mathcal{I}_-$, entonces la parte de la ecuación de movimiento (4.42) que esta constituida únicamente por monomios a_l con $l \in \mathcal{I}_+$.

La demostración de II) se sigue de la eliminación de algunos términos adicionales, de la forma $a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3} a_{l_4}$, $a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3} a_{l_4}^*$ y sus complejos conjugados, con $l_1, l_2, l_3, l_4 \in \mathcal{I}_+$. Las condiciones de resonancia involucran respectivamente

$$\begin{aligned} \Omega_{l_1} + \Omega_{l_2} + \Omega_{l_3} + \Omega_{l_4} &\geq 4\Omega_c > O(1), \\ \Omega_{l_1} + \Omega_{l_2} + \Omega_{l_3} + \Omega_{l_4} &\geq 2\Omega_c > O(1). \end{aligned}$$

Por lo tanto la parte cuadrática y cuártica de $\tilde{\mathcal{H}}(a)$, restringida a V_+ , y denotada ahora por $\bar{\mathcal{H}}_+(a)$, es

$$\bar{\mathcal{H}}_+ = \sum_{d=1}^D \sum_{l \in \mathcal{I}_+} \omega_l a_l a_l^* + \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} [a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3}^* a_{l_4}^*]. \quad (4.43)$$

La ecuación (4.43) tiene una forma muy peculiar, ya que la parte cuadrática se puede expresar como $a_l a_l^*$ y en la parte cuártica aparecen monomios de la forma $a_{l_1} a_{l_2} a_{l_3}^* a_{l_4}^*$, lo cual le imprime una simetría bajo cambios de fase global, es decir $\bar{\mathcal{H}}_+(ae^{i\phi}) = \bar{\mathcal{H}}_+(a)$ para todo $a \in V_+$ y $\phi \in \mathbb{R}$, tal que el Hamiltoniano tiene una constante adicional de movimiento. Las consecuencias de la simetría de $\bar{\mathcal{H}}_+$ bajo cambios de fase global se estudian en la subsección 4.4.

□

4.3. Subespacio invariante: caso general

En esta sección se aborda el caso de las configuraciones con frecuencias que van llenando la banda de separación en el espectro como es el caso de cadenas unidimensionales con dos y tres regiones de aglomeración (ver ejemplos 2–5 del capítulo 3) hasta las configuraciones que no presentan dicha banda como son los ejemplos con densidad variable de partículas, pero que las frecuencias cambian suavemente, como ocurre con la Ribozima y la Subtilisina (ejemplos 8 y 9 respectivamente de la sección 3.2 del capítulo 3).

El primer ejemplo de configuración de partículas donde se observa como algunas frecuencias comienzan a llenar la banda de separación es el 3 del capítulo 3. Un intento para extender el método visto en la sección 4.2 (con una banda de separación) es dividir nuevamente el espectro, pero ahora en tres regiones como se indica en la figura 4.3.

$$\mathcal{I}_- = \{\text{modos bajos}\}, \quad \mathcal{I}_m = \{\text{modos medios}\}, \quad \mathcal{I}_+ = \{\text{modos altos}\}.$$

Haciendo la definición

$$G' = \Omega_c - \omega_c, \quad \text{con } \Omega_c = \min_{k \in \mathcal{I}_+} \{\Omega_k\}, \quad \omega_c = \max_{l \in \mathcal{I}_-} \{\omega_l\}, \quad (4.44)$$

es posible repetir los argumentos de la sección 4.2 para monomios que combinan modos a_{l_d} , $l \in \mathcal{I}_-$ y a_{k_d} , $k \in \mathcal{I}_+$. Sin embargo, el argumento deja de funcionar para los monomios que combinan modos medios a_{l_d} , $l \in \mathcal{I}_m$ y altos a_{k_d} , $k \in \mathcal{I}_+$, ya que haciendo la definición

$$G'' = \Omega_c - \omega_c, \quad \text{con } \Omega_c = \min_{k \in \mathcal{I}_+} \{\Omega_l\}, \quad \omega_c = \max_{l \in \mathcal{I}_m} \{\omega_l\}. \quad (4.45)$$

Resulta que $G'' < O(1)$ como consecuencia de la reducción del gap, y por lo tanto, existen monomios que no necesariamente satisfacen las condiciones de resonancia, por ejemplo

$$\Omega_{l_1} - \Omega_{l_2} - \omega_{l_3} + \Omega_{l_4} \approx G'' < O(1), \quad (4.46)$$

es decir, no hay el equivalente a la tabla 4.3 para este caso. Esta limitación también se presenta en los casos con tres y más aglomeraciones y el caso extremo ocurre cuando deja de existir la banda de separación.

Observación 7. $G'' \sim \omega_2 \sim (\Delta\omega)_{\min} =$ mínima diferencia entre frecuencias ω_{j+1}, ω_j con $j \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m \cup \mathcal{I}_+$, es decir, G'' es del orden del parámetro pequeño para cada configuración.

La forma de extender el argumento de la sección 4.2 para estos casos es utilizando una propiedad distinta. Esta propiedad esta relacionada con la magnitud de los factores $\Gamma_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ respecto a la condición de resonancia (4.36), como se explica a continuación:

Recordando de la sección 4.1 que para eliminar un monomio \mathcal{M} de \mathcal{H}_4 se debe encontrar un monomio $\mathcal{S}_{\mathcal{M}}$ (4.35) de la forma

$$\mathcal{S}_{\mathcal{M}} = i \frac{\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4}}{\sum_{j=1}^4 \sigma(k_j) \omega_{k_j}} b_{k_1} b_{k_2} b_{k_3} b_{k_4},$$

en el análisis previo para $\mathcal{S}_{\mathcal{M}}$ de la sección 4.2 se tomó en cuenta únicamente la condición de no resonancia $|\sum_{j=1}^4 \sigma(k_j) \omega_{k_j}| > O(1)$, pero en el monomio (4.35) también aparece el factor $\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4}$ definido en (2.81) y que entre otras cosas incorpora a la matriz de interacción (2.4) que involucra el traslape entre los diferentes modos normales. La idea es examinar para que índices $k_1 \in \mathcal{I}_-, k_2, k_3, k_4 \in \mathcal{I}_+$ el factor $\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4} \ll O(1)$. Como en el monomio $\mathcal{S}_{\mathcal{M}}$ el coeficiente que acompaña al producto de los modos es un cociente de $\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4}$ y la condición de resonancia, entonces puede ocurrir el siguiente escenario

$$\left| \sum_{j=1}^4 \sigma(k_j) \omega_{k_j} \right| < O(1), \quad \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4} \ll O(1),$$

por lo tanto, lo que se debe es analizar el balance entre ambas cantidades, para ello, se define E_{k_1} como,

$$E_{k_1} = \max_{k_2, k_3, k_4 \in \mathcal{I}_+} \left\{ \max_{\sigma(i)=\pm 1} \left| \frac{\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4}}{\sum_{j=1}^4 \sigma(k_j) \omega_{k_j}} \right| \right\}, \quad k_1 \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m. \quad (4.47)$$

También se define \tilde{E} como

$$\tilde{E} = \max_{k \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m} \{E_k\}. \quad (4.48)$$

Una precisión sobre E_{k_1} es que el primer máximo actúa sobre todas las posibles combinaciones de sumas en el denominador, con uno de los sumandos fijo ω_{k_1} , $k_1 \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m$ y tomando todas las combinaciones de sumandos ω_{k_j} , $k_j \in \mathcal{I}_+$, $j = 2, 3, 4$, incluyendo las combinaciones de signos $\sigma(k_j)$. El segundo máximo (exterior) actúa sobre todas las combinaciones de índices $k_2, k_3, k_4 \in \mathcal{I}_+$ manteniendo fijo el índice $k_1 \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m$.

Para encontrar una descomposición del espectro en los conjuntos $\mathcal{I}_-, \mathcal{I}_m$ y \mathcal{I}_+ se hace uso de E_{k_1} (4.47). El criterio esta basado en dejar variar tres índices k_2, k_3, k_4 en la región alta del espectro (esto le imprime un carácter subjetivo, pero se puede reducir, variando también los modos en la parte alta) y dejar variar k_1 con la condición de $k_1 < \{k_2, k_3, k_4\}$. Los resultados para el calculo de E_{k_1} dependen de cada configuración. Sin embargo, el indicador de que se ha pasado de un conjunto de modos a otro (por ejemplo de \mathcal{I}_- a \mathcal{I}_m) es un incremento en el orden de magnitud de E_{k_1} (por ejemplo $O(E_{k_1}) \approx 10^{-1}$ y al llegar k_1 un valor crítico, ocurre $O(E_{k_1}) \approx 10^0$).

A continuación se presenta el análisis de las gráficas de E_{k_1} para tres configuraciones representativas de las diferentes formas del espectro.

Ejemplo 3, (Capítulo 3 Cadena con dos regiones de aglomeración con $N = 113$ sitios). Para este ejemplo al igual que todos los que presentan bandas de separación se puede dividir el espacio de los modos de vibración, así los modos bajos se representan con

$$\mathcal{I}_- = \{2, \dots, 98\}, \mathcal{I}_m = \{99, \dots, 103\}, \mathcal{I}_+ = \{104, \dots, 113\}.$$

El criterio para elegir de esta forma los modos esta sugerido por la propia relación de dispersión (ver figura 4.3 a)), al evaluar el valor de E para este caso se obtiene que su magnitud cambia como se muestra en la figura 4.3 b). Para determinar E_{k_1} para este caso se hace con la combinaciones de índices $k_2, k_3, k_4 \in \mathcal{I}_+$ y $k_1 \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m$. Si se permite que k_1 tome valores en \mathcal{I}_+ , aparecen divisores tales que el valor de E_{k_1} pasa de tener valores $O(10^{-3})$ a tomar valores $O(10^8)$, este fenómeno es un indicador de que se ha alcanzado la variedad formada por los modos con índices en \mathcal{I}_+ como se explico anteriormente.

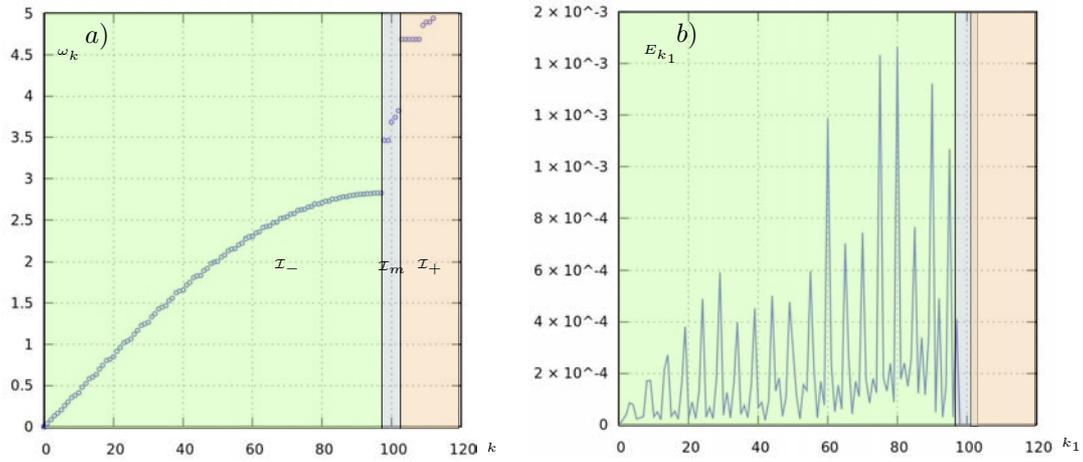


Figura 4.3: Ejemplo 3. a) Relación de dispersión sobre la que se indica la región a la que corresponden los modos bajos \mathcal{I}_- , medios \mathcal{I}_m y altos \mathcal{I}_+ . b) E_{k_1} con $k_1 \in \{2 \dots 103\}$ y $k_2, k_3, k_4 \in \{104 \dots 113\}$.

Ejemplo 8, (Capítulo 3, sección 3.1, Ribozima con $N = 879$ sitios). Este es uno de los dos ejemplos para configuraciones que no tienen cambios abruptos en la densidad de partículas y también al caso donde la relación de dispersión cambia suavemente. Para implementar el criterio de búsqueda de los conjuntos \mathcal{I}_- , \mathcal{I}_m y \mathcal{I}_+ se hicieron variar $k_2, k_3, k_4 \in \{850 \dots 879\}$ y $k_1 \in \{2 \dots 849\}$, con lo que se obtuvo la gráfica para E_{k_1} . En la Figura 4.4 se muestra los resultados para E_{k_1} . Se puede observar que este factor permanece menor a $O(10^{-3})$ cuando $k_1 \in \{1 \dots 787\}$, justo al rebasar esta cantidad comienza un crecimiento exponencial que alcanza el $O(10^0)$ en apenas algunos incrementos sobre k_1 . Esto permite definir la región de los modos de vibración que constituyen \mathcal{I}_- que en este caso es $k \in \{1 \dots 787\}$. Después viene un conjunto intermedio (medio) \mathcal{I}_m con el que la parte alta del espectro tiene un intercambio de energía mayor y que esta constituido por los modos $k \in \{788 \dots 849\}$ y por último, el conjunto \mathcal{I}_+ esta constituido por los modos $k \in \{850 \dots 879\}$, que corresponde con la parte alta del espectro. De esta forma

se tiene como primera aproximación

$$\mathcal{I}_- = \{2, \dots, 787\}, \mathcal{I}_m = \{788, \dots, 849\}, \mathcal{I}_+ = \{850, \dots, 879\}.$$

Ejemplo 1, (Capítulo 3, sección 3.1. Cadena unidimensional sin aglomeraciones con $N = 100$ sitios). Este es el ejemplo más sencillo desde el punto de vista conformacional, sin embargo, tiene la peculiaridad de mostrar un espectro que cambia suavemente como se describe anteriormente. Para implementar la búsqueda de los conjuntos \mathcal{I}_+ y \mathcal{I}_- se hacen variar $k_2, k_3, k_4 \in \{90 \dots 100\}$ y $k_1 \in \{2 \dots 89\}$ (el valor $k_1 = 1$ fue removido con la simetría ante traslaciones, proposición 9). La Figura 4.5 a) muestra el resultado para E_{k_1} . Se puede observar que este factor permanece por debajo del $O(10^{-1})$ cuando $k_1 \leq 70$, al superar este valor, E_{k_1} incrementa en un orden su magnitud para $k_1 \in \{71 \dots 89\}$. Esto da origen a la aparición de un conjunto de modos \mathcal{I}_m (modos medios) constituido precisamente por los modos $k \in \{71 \dots 89\}$. En la parte b) de la misma figura se muestra la región correspondiente sobre el espectro para cada grupo de modos \mathcal{I}_- (bajos), \mathcal{I}_m (medios) y \mathcal{I}_+ (altos).

$$\mathcal{I}_- = \{2, \dots, 70\}, \mathcal{I}_m = \{71, \dots, 89\}, \mathcal{I}_+ = \{90, \dots, 100\}.$$

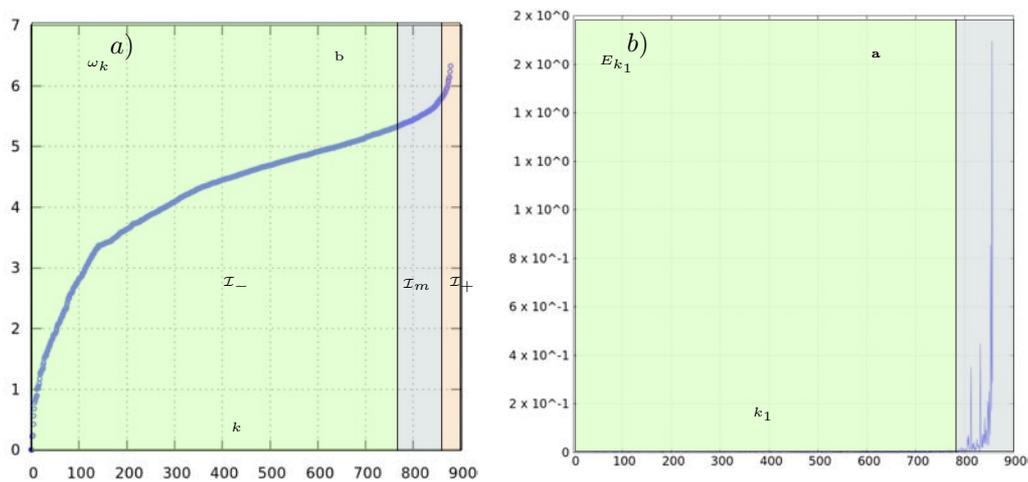


Figura 4.4: Ejemplo 1: a) Relación de dispersión, sobre la que se indica la región a la que corresponden los modos bajos \mathcal{I}_- , medios \mathcal{I}_m y altos \mathcal{I}_+ . b) E_{k_1} con $k_1 \in \{2 \dots 849\}$ y $k_2, k_3, k_4 \in \{850 \dots 879\}$.

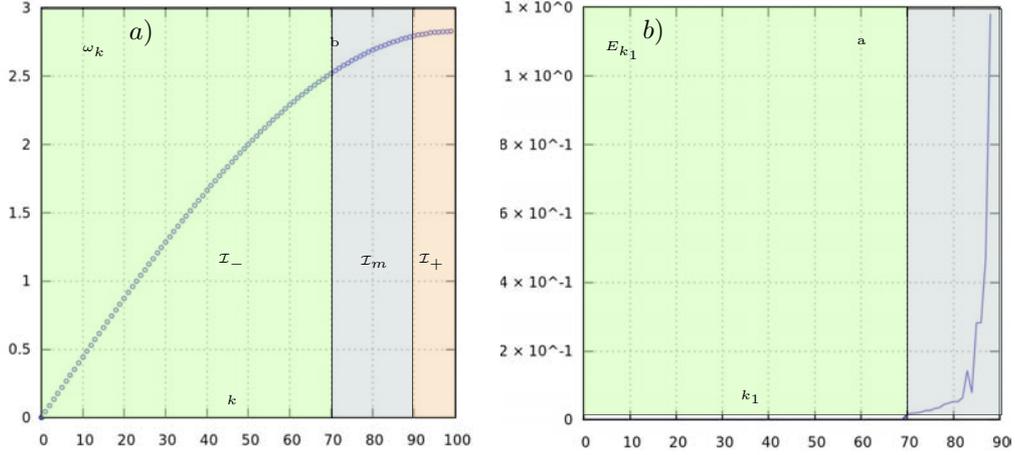


Figura 4.5: Ejemplo 1: a) Relación de dispersión, sobre la que se indica la región a la que corresponden los modos bajos \mathcal{I}_- , medios \mathcal{I}_m y altos \mathcal{I}_+ . b) E_{k_1} con $k_1 \in \{2 \dots 89\}$ y $k_2, k_3, k_4 \in \{90 \dots 100\}$.

Otras configuraciones de partículas caen en alguno de los ejemplos anteriores. Lo relevante del análisis previo es la magnitud del factor E_{k_1} , además de ayudar a identificar los distintos espacios de modos, también indica que los modos altos tienen un traslape débil con el resto, esto permite plantear la proposición 13 para la convergencia de la solución de la forma normal, y una proposición idéntica a 12, es decir, una eliminación en dos etapas como son los caso I) y II). De modo que se presenta la proposición 14 para los casos sin bandas, para la cual requerimos de una definición y proposición previas.

Definición 7. Sea $\chi : D \mapsto \mathbb{R}$, $D \subseteq \mathbb{R}^{2N}$, definimos la norma $\|\chi\|_D = \sup_{z \in D} |\chi(z)|$ (Notación $D = B(0, \rho)$), $\|\chi\|_\rho = \|\chi\|_{B(0, \rho)}$.

Proposición 13. El cambio simpléctico de variables es generado por la función χ

$$\chi = \sum_{\substack{k_1 k_2 k_3 k_4 \in \\ \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m \cup \mathcal{I}_+}} \frac{\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4}}{\sum_i \sigma(k_i) \omega_{k_i}} b_{k_1} b_{k_2} b_{k_3} b_{k_4}, \text{ y } \frac{1}{r} \|\chi\| \approx O(1). \quad (4.49)$$

con $k_1 \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m$, $k_2, k_3, k_4 \in \mathcal{I}_+$ y $r \in \mathbb{R}$.

Demostración 13. De la definición (4.47) se tiene

$$\left| \frac{\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4}}{\sum_i \sigma(k_i) \omega_{k_i}} b_{k_1} b_{k_2} b_{k_3} b_{k_4} \right| \leq E_{k_1} |b_{k_1} b_{k_2} b_{k_3} b_{k_4}|, \forall k_1 \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m, \forall k_2, k_3, k_4 \in \mathcal{I}_+ \quad (4.50)$$

por lo tanto

$$\sum_{\substack{k_1 k_2 k_3 k_4 \in \\ \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m \cup \mathcal{I}_+}} \left| \frac{\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4}}{\sum_i \sigma(k_i) \omega_{k_i}} b_{k_1} b_{k_2} b_{k_3} b_{k_4} \right| \leq \sum_{\substack{k_1 k_2 k_3 k_4 \in \\ \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m \cup \mathcal{I}_+}} |E_{k_1} b_{k_1} b_{k_2} b_{k_3} b_{k_4}|, \quad (4.51)$$

si $N_1 = \dim\{\mathcal{I}_+\}$ y $N_2 = \dim\{\mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m\}$, entonces, la cantidad de elementos en cada una de las sumas de la expresión anterior es $N_2 N_1^3 < N^4$, ya que $N_1, N_2 < N$, por lo tanto

$$\|\chi\|_\rho \leq \sum_{\substack{k_1 k_2 k_3 k_4 \in \\ \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m \cup \mathcal{I}_+}} \left| \frac{\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4}}{\sum_i^4 \sigma(k_i) \omega_{k_i}} b_{k_1} b_{k_2} b_{k_3} b_{k_4} \right| \leq N_2 N_1^3 \tilde{E},$$

si χ es analítica real (ver [68]), entonces el radio de convergencia de la serie infinita esta dado por

$$\Delta\epsilon \approx \frac{1}{\|\chi\|_\rho}, \text{ con } \Delta\epsilon \approx 1. \Rightarrow \|\chi\|_\rho \approx 1 \quad (4.52)$$

□

Proposición 14. Con el cambio simpléctico de variables $a = f(\tilde{a})$, donde $a = \tilde{a} + \{\text{términos cúbicos}\}$, y $a = (a_2, \dots, a_N)$, $\tilde{a} = (\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N)$ (donde \tilde{a} son las variables originales), que es generado por \mathcal{S} , como se indica en (4.29), tal que \mathcal{S} es una suma de monomios $\mathcal{S}_{\mathcal{M}}$ con la forma (4.35) y los coeficientes cumple con

$$\frac{\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4}}{\sum_{j=1}^4 \sigma(k_j) \omega_j} \leq \tilde{E},$$

o equivalentemente se cumple $\sum_{j=1}^4 \sigma(k_j) \omega_j \geq 2\Omega_c - \Delta$, Ω_c, Δ como en (4.38), (4.39), entonces se satisface

- I. El subespacio V_+ definido por $\tilde{a}_j = 0, \forall j \in \mathcal{I}_-$, es invariante bajo el el flujo Hamiltoniano de la parte cuártica de la forma normal $\tilde{\mathcal{H}}$ de (4.33), y
- II. La parte cuártica de $\tilde{\mathcal{H}}$, restringida a V_+ es invariante bajo la acción $\tilde{a}_j \mapsto \tilde{a}_j e^{i\phi}, \forall j \in \mathcal{I}_+, \phi \in \mathbb{R}$.

Demostración 14. Para la parte (i) es posible expresar las ecuaciones para $\dot{a}_{l,d}, l \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m, d \in [1 \dots D]$, como

$$\dot{a}_{l,d} = -i\omega_l a_{l,d} + M_+^l + M_{-/m/+}^l, \quad l \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_+, d \in \{1, \dots, D\}, \quad (4.53)$$

donde M_+^l representa la suma de los monomios de $a_{l,d}, a_{l,d}^*$ con índices l únicamente en \mathcal{I}_+ , y $M_{-/m/+}^l$ representa el resto. Un monomio en M_+^l corresponde a un monomio de \mathcal{H}_4 con coeficientes $\tilde{\Gamma}_{lk_2 k_3 k_4}, l \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m$. Entonces, suponiendo que

$$\frac{\tilde{\Gamma}_{k k_2 k_3 k_4}}{\sum_i^4 \sigma(k_i) \omega_{k_i}} \leq E_k \leq \tilde{E},$$

todos los monomios de \mathcal{H}_4 permiten que M_+^l puedan ser removidos utilizando transformaciones simplécticas con las propiedades que indica el enunciado.

Para la parte (ii) son eliminados todos los monomios $a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_2} a_{l_3, d_3} a_{l_4, d_4}^*, a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_2} a_{l_3, d_3} a_{l_4, d_4}$, con $l_1, l_2, l_3, l_4 \in \mathcal{I}_+, d_1, d_2, d_3, d_4 \in \{1, \dots, D\}$, (y sus complejos conjugados), de \mathcal{H} . Los coeficientes para los monomios $a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_2} a_{l_3, d_3} a_{l_4, d_4}^*, l_1, l_2, l_3, l_4 \in \mathcal{I}_+$ (y sus complejos conjugados) en \mathcal{S} son

$$\frac{\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}}{\sum_{j=1}^4 \sigma(k_j) \omega_j}, \quad \text{con} \quad \sum_{j=1}^4 \sigma(k_j) \omega_j = \Omega_{l_1} + \Omega_{l_2} + \Omega_{l_3} - \Omega_{l_4} \geq 2\Omega_c - \Delta.$$

De manera análoga los coeficientes para $a_{l_1,d_1} a_{l_2,d_2} a_{l_3,d_3} a_{l_4,d_4}$ $l_1, l_2, l_3, l_4 \in \mathcal{I}_+$ (y sus complejos conjugados) en \mathcal{S} son

$$\frac{\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}}{\sum_{j=1}^4 \sigma(k_j) \omega_j}, \quad \text{con} \quad \sum_{j=1}^4 \sigma(k_j) \omega_j = \Omega_{l_1} + \Omega_{l_2} + \Omega_{l_3} + \Omega_{l_4} \geq 4\Omega_c \geq 2\Omega_c - \Delta.$$

Por lo tanto $\bar{\mathcal{H}}$, restringido a V_+ , y denotado por $\bar{\mathcal{H}}_+$, es

$$\bar{\mathcal{H}}_+(a) = \sum_{d=1}^D \sum_{l \in \mathcal{I}_+} \omega_l a_{l,d} a_{l,d}^* + \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \left[a_{l_1, d_1} a_{l_2, d_1} a_{l_3, d_2}^* a_{l_4, d_2}^* \right], \quad (4.54)$$

que es invariante ante cambios de fase global. □

4.4. Órbitas periódicas en el subespacio V_+ y su estabilidad

De la simetría de las ecuaciones (4.43) y (4.54) se tiene $\bar{\mathcal{H}}_+(ae^{i\phi}) = \bar{\mathcal{H}}_+(a)$, es decir, $\bar{\mathcal{H}}_+$ es invariante ante cambios de fase global, entonces, se plantea lo siguiente.

Proposición 15. Como el *Hamiltoniano* $\bar{\mathcal{H}}_+$ es invariante ante el cambio de fase global, entonces existe \mathcal{P} tal que se satisface

$$[\bar{\mathcal{H}}_+, \mathcal{P}] = 0, \quad \text{donde} \quad \mathcal{P} = \sum_{d=1}^D \sum_{l \in \mathcal{I}_+} a_{l,d} a_{l,d}^*. \quad (4.55)$$

La proposición implica que \mathcal{P} es una cantidad conservada a lo largo de la evolución del *Hamiltoniano* $\bar{\mathcal{H}}_+$.

Demostración 15. Sea $\psi_\phi(a) = e^{i\phi} a$, entonces

$$\frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+(\psi_\phi(a))}{\partial \phi} = [\nabla \bar{\mathcal{H}}_+(\psi_\phi(a))]^T \frac{\partial \psi_\phi(a)}{\partial \phi} = 0, \quad \forall \phi. \quad (4.56)$$

Ademas

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \psi_\phi(a_l) = \frac{\partial}{\partial \phi} a_l e^{-i\phi} = i a_l = -i \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial a_l^*} \psi_\phi(a), \quad (4.57)$$

entonces

$$\frac{\partial \psi_\phi(a)}{\partial \phi} = \mathbb{J} \nabla \mathcal{P}(\psi_\phi(a)), \quad (4.58)$$

donde \mathbb{J} es la matriz *simpléctica* (2.37), por lo tanto, de (4.56) y (4.58) se tiene

$$[\nabla \bar{\mathcal{H}}_+(\psi_\phi(a))]^T \mathbb{J} \nabla \mathcal{P}(\psi_\phi(a)) = [\bar{\mathcal{H}}_+, \mathcal{P}](\psi_\phi(a)) = 0. \quad (4.59)$$

□

Proposición 16. Sea $\bar{\mathcal{H}}_+ : \mathbb{C}^{N_1} \rightarrow \mathbb{R}$ invariante bajo el cambio de fase global, entonces el sistema Hamiltoniano $\bar{\mathcal{H}}_+$ tiene al menos $N_1 = \dim(\mathcal{I}_+)$ órbitas periódicas de la forma $a_{k,d}(t) = e^{-i\lambda t} A_{k,d}$, $k \in \mathcal{I}_+$, $d \in \{1 \dots D\}$ (soluciones tipo “breather”), para cada *hipersuperficie* definida por $\mathcal{P} = C$ ([16], ver Teorema 1).

Demostración 16. Las órbitas periódicas de la proposición 16 son equilibrios relativos de la simetría $a_{k,d} \mapsto e^{i\phi} a_{k,d}$, y se plantea la existencia de soluciones de la forma:

$$a_{k,d}(t) = e^{-i\lambda t} A_{k,d}, \text{ con } k \in \mathcal{I}_+, d \in \{1 \dots D\}, \quad (4.60)$$

entonces se satisface

$$\mathcal{P} = \sum_{d=1}^D \sum_{k \in \mathcal{I}_+} a_{k,d} a_{k,d}^* = \sum_{d=1}^D \sum_{k \in \mathcal{I}_+} e^{-i\lambda t} A_{k,d} e^{i\lambda t} A_{k,d}^* = \sum_{d=1}^D \sum_{k \in \mathcal{I}_+} A_{k,d} A_{k,d}^*. \quad (4.61)$$

Por lo tanto

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial A_{k,d}^*} = A_{k,d}, \quad \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial A_{k,d}} = A_{k,d}^*, \quad (4.62)$$

derivado de la relación (4.60) se cumple $A_{k,d}^* = e^{i\lambda t} a_{k,d}^*$, por lo tanto

$$\frac{\partial A_{k,d}^*}{\partial a_{k,d}^*} = e^{i\lambda t}. \quad (4.63)$$

Por otra parte, recordando las ecuaciones de movimiento para $\bar{\mathcal{H}}_+$, se tiene

$$\dot{a}_{k,d} = -i \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial a_{k,d}^*} = -i \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}^*} \frac{\partial A_{k,d}^*}{\partial a_{k,d}^*} = -i e^{-i\lambda t} \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}^*}, \text{ con } k \in \mathcal{I}_+, d \in \{1 \dots D\}. \quad (4.64)$$

De la ecuación (4.60) se tiene

$$\dot{a}_{k,d} = -i\lambda e^{-i\lambda t} A_{k,d}, \quad (4.65)$$

al igualar (4.64) con (4.65) se tiene

$$\lambda A_{k,d} = \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}^*}. \quad (4.66)$$

utilizando las relaciones de (4.62)

$$\lambda \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial A_{k,d}^*} = \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}^*}, \quad \forall k \in \mathcal{I}_+, d \in \{1 \dots D\}. \quad (4.67)$$

por lo tanto

$$\lambda \nabla \mathcal{P} = \nabla \bar{\mathcal{H}}_+. \quad (4.68)$$

□

La hipersfera $\mathcal{P} = C > 0$ contiene diferentes hipersuperficies de energía constante, de donde se desprende la existencia de dos extremos que corresponden a la máxima y a la mínima energía, con la restricción de permanecer en la hipersfera $\mathcal{P} = C > 0$.

$$E_{max} = \max_{\mathbf{A} \in \{\mathcal{P}=C\}} \bar{\mathcal{H}}_+(\mathbf{A}), \quad E_{min} = \min_{\mathbf{A} \in \{\mathcal{P}=C\}} \bar{\mathcal{H}}_+(\mathbf{A}). \quad (4.69)$$

En la siguiente sección se presenta un método para alcanzar el máximo y el mínimo de la energía, con la restricción de permanecer sobre la hipersfera de radio $\mathcal{P} = C > 0$.

Además, el problema ha sido reducido a encontrar los puntos críticos de $\bar{\mathcal{H}}_+$ en la hipersfera $\mathcal{P} = C$ en $\mathbb{C}^{N_1} \approx \mathbb{R}^{2N_1}$, es decir a la hipersfera \mathbb{S}^{2N_1-1} y se puede reducir aun más el espacio donde ocurre la dinámica notando que si dados dos puntos $u, v \in \mathbb{C}^{N_1}$ que satisfacen la relación $u = e^{i\phi}v$ con $\phi \in \mathbb{R}$ donde $\bar{\mathcal{H}}_+(u) = \bar{\mathcal{H}}_+(v)$ entonces u y v están en una variedad de dimensión $2N_1 - 2$ la cual se puede identificar con $\mathcal{P}^{-1}(C)/\mathbb{S}^1$ el espacio *complejo proyectivo*, donde $C \in \mathbb{R}^+$ y \mathbb{S}^1 es un círculo. Las órbitas periódicas en \mathbb{S}^{2N_1-1} se ven ahora como puntos críticos del espacio *complejo proyectivo* $\mathcal{P}^{-1}/\mathbb{S}^1$, además se sabe que existen por lo menos $N_1 = \dim\{\mathcal{I}_+\}$ puntos críticos, ver [16].

Recordando que \mathcal{P} es constante, la ecuación (4.68) indica que se están buscando puntos críticos de $\bar{\mathcal{H}}_+$, estos puntos críticos, son órbitas periódicas de la forma $a_{k,d} = e^{-i\lambda t} A_{k,d}$, $k \in \mathcal{I}_+$, $d \in \{1 \dots D\}$. De esta forma, cuando se fija $\mathcal{P} = C$ queda definida una hipersfera en el espacio fase que contiene diferentes hipersuperficies de energía constante, este resultado se puede comparar al Teorema de *Weinstein-Moser* [15], [16] que se enuncia después de los siguientes preliminares:

Sea el sistema Hamiltoniano

$$\dot{z} = \mathbb{J}\nabla\bar{\mathcal{H}}_+, \quad z \in \mathbb{R}^{2N_1} \quad (4.70)$$

y sea $z = 0$ un equilibrio de (4.70).

Teorema 1. (Weinstein-Moser): Si $\bar{\mathcal{H}}_+ \in \mathbb{C}^2$ (existen las segundas derivadas y son continuas) cerca de $z = 0$ y la matriz Hessiana $\bar{\mathcal{H}}_{+zz}$ en el origen y es positiva definida, entonces para ϵ suficientemente pequeño cualquier hipersuperficie de energía \mathcal{E} que satisface $\bar{\mathcal{H}}_+(z) = \mathcal{E}$ contiene al menos N_1 órbitas periódicas, cuyos periodos son cercanos a los del sistema linealizado.

La demostración se puede consultar en [15].

Para el caso que se presenta en este trabajo, no son las hipersuperficies de energía constante donde se encuentran las órbitas periódicas, son de manera análoga, las hipersuperficies de $\mathcal{P} = C > 0$. Sin embargo, el Teorema 1 no indica como encontrar órbitas periódicas sin la suposición de simetría.

4.4.1. Determinación de órbitas periódicas a partir de puntos críticos en la esfera $\mathcal{P} = C$

Un mecanismo para determinar órbitas periódicas cerca en la vecindad de puntos críticos es utilizar el método del decaimiento mas pronunciado [69] [70], para ello hacemos el cambio de variables (4.73), con $k \in \mathcal{I}_+$. La primer parte del método consiste en integrar un tiempo Δt las soluciones anteriores utilizando por ejemplo el método de Euler, para después normalizar la solución y con ello garantizar que la solución

numérica vuelve a quedar sobre la superficie de la hiperesfera \mathcal{P} .

Se define

$$\dot{z} = \pm \nabla \bar{\mathcal{H}}_+, \text{ donde } z = [q, p], \quad \nabla = [\partial_{q_{k,d}}, \partial_{p_{k,d}}], \quad (4.71)$$

por lo tanto

$$\dot{q}_{k,d} = \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial q_{k,d}}, \quad \dot{p}_{k,d} = \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial p_{k,d}}, \quad \forall k \in \mathcal{I}_+ \quad d \in \{1 \dots D\}. \quad (4.72)$$

Haciendo el cambio de variables

$$A_{k,d} = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_{k,d} + ip_{k,d}), \quad A_{k,d}^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_{k,d} - ip_{k,d}), \quad (4.73)$$

se tiene para $\dot{a}_{k,d}$

$$\begin{aligned} \dot{A}_{k,d} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\dot{q}_{k,d} + i\dot{p}_{k,d}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial q_{k,d}} + i \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial p_{k,d}} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}} \frac{\partial A_{k,d}}{\partial q_{k,d}} + \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}^*} \frac{\partial A_{k,d}^*}{\partial q_{k,d}} + i \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}} \frac{\partial A_{k,d}}{\partial p_{k,d}} + i \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}^*} \frac{\partial A_{k,d}^*}{\partial p_{k,d}} \right], \end{aligned} \quad (4.74)$$

utilizando las relaciones de (4.73), se simplifica la ecuación anterior

$$\begin{aligned} \dot{A}_{k,d} &= \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}} + \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}^*} - \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}} + \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}^*}, \\ \dot{A}_{k,d} &= \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial A_{k,d}^*}. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Usando la expresión (4.43) para $\bar{\mathcal{H}}_+$, el gradiente no Hamiltoniano, $\dot{A}_{k,d}$ queda definida como

$$\begin{aligned} \dot{A}_{k,d} &= \omega_k A_{k,d} + \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_4} A_{k_1, d_1} A_{k_2, d_2} A_{k_4, d_2}^* \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3} A_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} A_{k_3, d_2}^* \right]. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Se puede integrar con algún esquema numérico la ecuación (4.76), para un tiempo $\Delta t < \tau_{\min}^*$, si embargo, es importante recordar que se tiene la restricción de permanecer sobre la superficie de la hiperesfera $\mathcal{P} = C$ con $C \in \mathbb{R}^+$ y esta constante depende de las condiciones iniciales de acuerdo con la ecuación (4.77). Para ejemplificar, se tomara el signo del gradiente como negativo (si se toma como positivo es completamente análogo). La energía se determina con la ecuación (4.43) y al tiempo $t = 0$ es representada con E_0 . Para este trabajo se utilizo el esquema numérico Runge Kutta de cuarto orden (RK4) [71]. Es importante remarcar que la integración se hace durante un intervalo (suficientemente pequeño para no alejarse mucho de la hiperesfera $\mathcal{P} = C$) de tiempo Δt con un paso δt . Al finalizar la integración, es necesario normalizar la solución a la hiperesfera para garantizar la restricción $\mathcal{P} = C$, de esta forma se tiene el esquema siguiente:

Al tiempo $t = 0$ se calcula \mathcal{P} con la ecuación

$$\mathcal{P} = \sum_{d=1}^D \sum_{k \in \mathcal{I}_+} A_{k,d} A_{k,d}^*, \quad (4.77)$$

(o) Se integra $A_{k,d}$, un periodo $\Delta t < \tau_{\min}^*$ con un paso δt , usando RK4.

$$A_{k,d}(t + \delta t) = \text{RK4}\{A, A^*, \delta t\}.$$

Se calcula la energía E_i con la ecuación (4.43), donde $i \in \mathbb{N}$ representa el número de veces que se calcula la energía. Se normaliza la solución respecto a \mathcal{P} y se comienza un nuevo ciclo de integración ($t = 0$) de longitud Δt a un paso δt y se actualiza $A_{k,d}(t)$ en la forma

$$A_{k,d}(t) = \frac{A_{k,d}(t)}{\mathcal{P}}.$$

El cálculo se repite desde (o), hasta que el cambio en la energía es menor que una constante dada, que en nuestro caso es 10^{-8} .

Lo que se obtiene es una sucesión para la energía, de tal manera que $E_1 > E_2 \dots E_i$ (para el caso del descenso), y las soluciones $a_{k,d}$ convergen a el punto crítico correspondiente a la hipersuperficie de energía mínima, el proceso se detiene hasta que la diferencia entre E_i y E_{i+1} es menor que una cierta tolerancia δE .

Para encontrar λ se utiliza

$$a_{k,d} = e^{-i\lambda t} A_{k,d}, \quad k \in \mathcal{I}_+, \quad k \in \{1 \dots D\}, \quad (4.78)$$

lo que implica

$$\dot{a}_{k,d} = -i\lambda e^{-i\lambda t} A_{k,d}, \quad (4.79)$$

y por otro, de la ecuación (4.43) se tiene

$$\begin{aligned} \dot{a}_{k,d} = & -i\omega_k a_{k,d} - i\frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} a_{k_1, d_1} a_{k_2, d_1} a_{k_4, d_2}^* \right. \\ & \left. + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} a_{k_1, d_1} a_{k_2, d_1} a_{k_3, d_2}^* \right], \end{aligned} \quad (4.80)$$

igualando la expresión (4.79) con (4.80) y sustituyendo $a_{k,d} = e^{-i\lambda t} A_{k,d}$, se tiene

$$\begin{aligned} \lambda A_{k,d} = & \omega_k A_{k,d} + \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} A_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} A_{k_4, d_2}^* \right. \\ & \left. + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} A_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} A_{k_3, d_2}^* \right], \end{aligned} \quad (4.81)$$

al multiplicar la expresión anterior por $A_{k,d}^*$ y sumando sobre todo $k \in \mathcal{I}_+$ y sobre $d \in \{1 \dots D\}$, se obtiene

$$\lambda = \frac{\sum_{d=1}^D \sum_{k \in \mathcal{I}_+} \omega_k A_{k,d} A_{k,d}^* + 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4} \left[A_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} A_{k_3, d_2}^* A_{k_4, d_2}^* \right]}{\sum_{d=1}^D \sum_{k \in \mathcal{I}_+} A_{k,d} A_{k,d}^*}. \quad (4.82)$$

Haciendo la definición η para el denominador de (4.82), se tiene $\lambda = \eta/\mathcal{P}$. Se puede ahora determinar el valor numérico de λ para diferentes ejemplos de configuraciones, a continuación se presenta este cálculo para algunos de ellos.

Ejemplo 2 (de la sección 3, $N = 109$): Este ejemplo corresponde con una cadena con una zona de aglomeración, se hace el cálculo utilizando como espacio invariante los modos con índices en \mathcal{I}_+ como se muestra en la sección 4.2. En las gráficas de la Figura 4.6 se muestra la evolución de los valores de la energía E_i , $i \in \mathbb{N}$. La parte a) corresponde a tomar el gradiente con signo negativo para aproximar numéricamente las mismas ecuaciones (4.76) y normalizar la solución cada Δt al tiempo que se monitorea la evolución de la energía, se encuentra que la solución se estabiliza en un punto mínimo (o máximo, dependiendo de si se toma el gradiente como $\nabla\bar{\mathcal{H}}_+ \mapsto \text{máx}$, o $-\nabla\bar{\mathcal{H}}_- \mapsto \text{mín}$) como se indica en la gráfica 4.6 b). Los cálculos se hicieron fijando los parámetros de la siguiente manera: la constante lineal del potencial $k_2 = 1.0$, la masa $m = 1.0$, y la constante que modula la no linealidad $k_4 = 1.0$.

Con los resultados de la sección 4.4.1 se puede calcular λ utilizando los valores $\{E_{min}, E_{max}\}$ para el ejemplo de la cadena con una aglomeración, ejemplo 2 de la sección 3.

$$\lambda = \begin{cases} \lambda_{\text{máx}} = 4.77109, \\ \lambda_{\text{mín}} = 4.76798, \end{cases} \quad \text{en ambos casos } k_4 = 1.0.$$

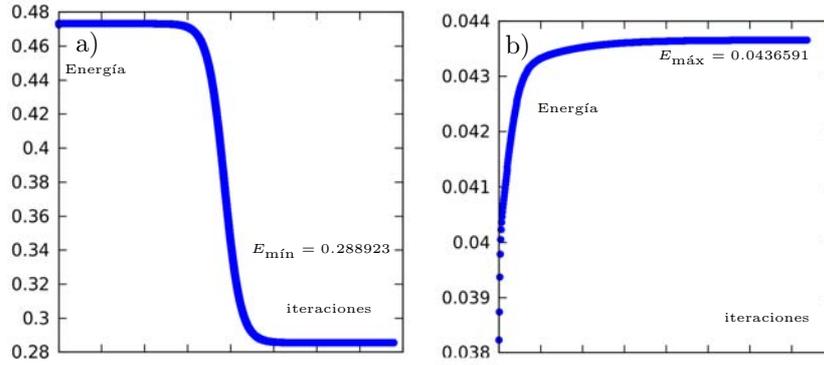


Figura 4.6: Se muestran las gráficas de la energía utilizando el método de gradiente. a) Para el ejemplo de la cadena con una aglomeración (descenso). b) Ejemplo de la cadena con una aglomeración (ascenso).

En las gráficas de la Figura 4.8 se muestra como cambia λ cuando cambia k_4 para el mínimo y el máximo de la hipersuperficie de energía.

En las Figuras 4.9, 4.10 y 4.11 (a) se observa la distribución de los modos $|A_{l,d}|$, $l \in \mathcal{I}_+$, $d \in [1, D]$. De las soluciones tipo breather correspondientes se observa que la no linealidad afecta marginalmente la distribución de los $|A_l|^2$ (unidimensional). En el ejemplo tridimensional de (4.11) (a) hacemos lo mismo para $|A_{l,1}|^2$, con $l \in \mathcal{I}_+$, en este caso, la distribución es muy sensible a los efectos de los términos no lineales, ya que las distribuciones para $k_4 = 0.0$ y para $k_4 = 1.0$ son muy diferentes. Se puede observar en la misma figura, como algunos de los modos mas altos han sido activados en la distribución correspondiente con $k_4 = 1.0$.

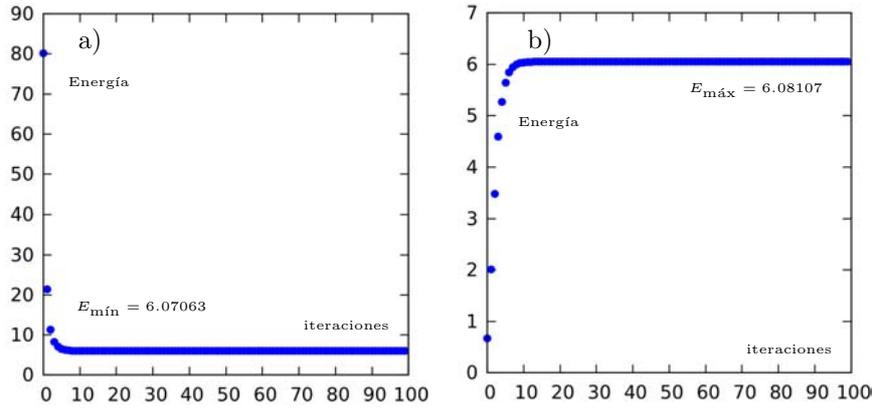


Figura 4.7: Se muestran las gráficas de la energía utilizando el método de gradiente. a) Ejemplo Ribozima (descenso). b) para la Ribozima (ascenso).

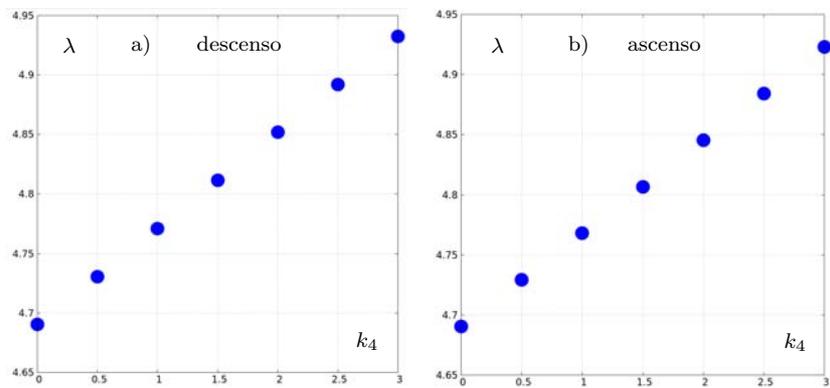


Figura 4.8: a) Cambio de λ con k_4 para el gradiente con signo negativo (descenso) b) Cambio de λ con k_4 para el gradiente con signo positivo (ascenso). En ambos casos $k_2 = m = 1$.

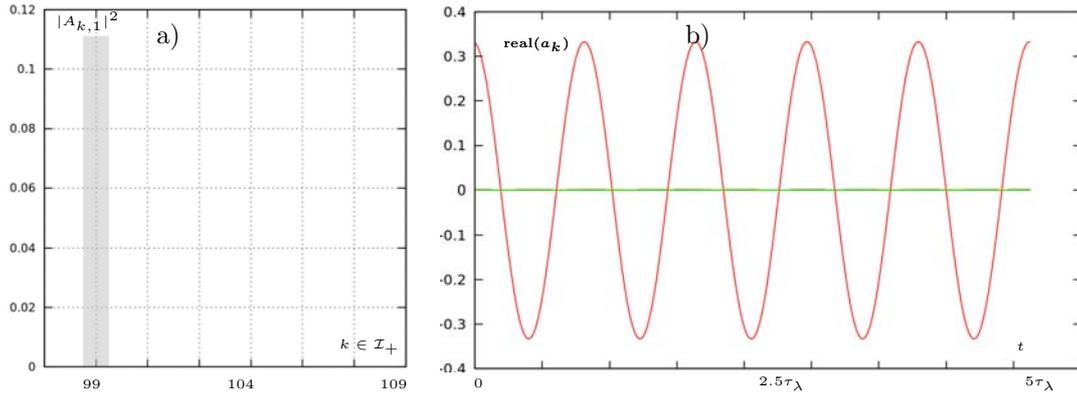


Figura 4.9: Ejemplo 2 (cadena unidimensional con una sola región de aglomeración): a) Distribución de la energía para los modos $k \in \mathcal{I}_+$ obtenidos con el método del gradiente (descendente) con los parámetros $k_2 = 1$, $k_4 = 1$ y $\mathcal{P} = 0.0022$. b) Evolución de a_k , $k \in \mathcal{I}_+$ utilizando como condición inicial la distribución de modos $|A_k|^2$ correspondiente al caso $k_4 = 1.0$.

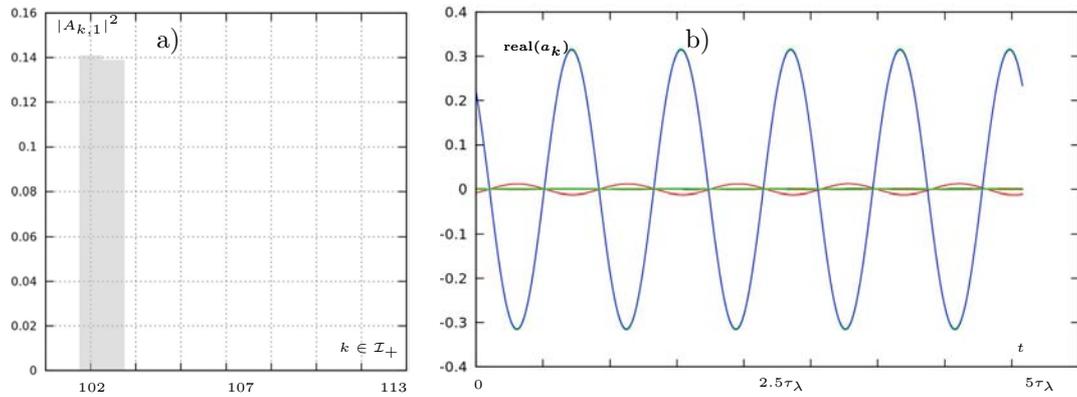


Figura 4.10: Ejemplo 3 (cadena unidimensional con dos regiones de aglomeración): a) Distribución de la energía para los modos $k \in \mathcal{I}_+$ obtenidos con el método del gradiente (descendente) con los parámetros $k_2 = 1$, $k_4 = 1$ y $\mathcal{P} = 0.28$. b) Evolución de a_k , $k \in \mathcal{I}_+$, utilizando como condición inicial la distribución de modos $|A_k|^2$ correspondiente al caso $k_4 = 1.0$.

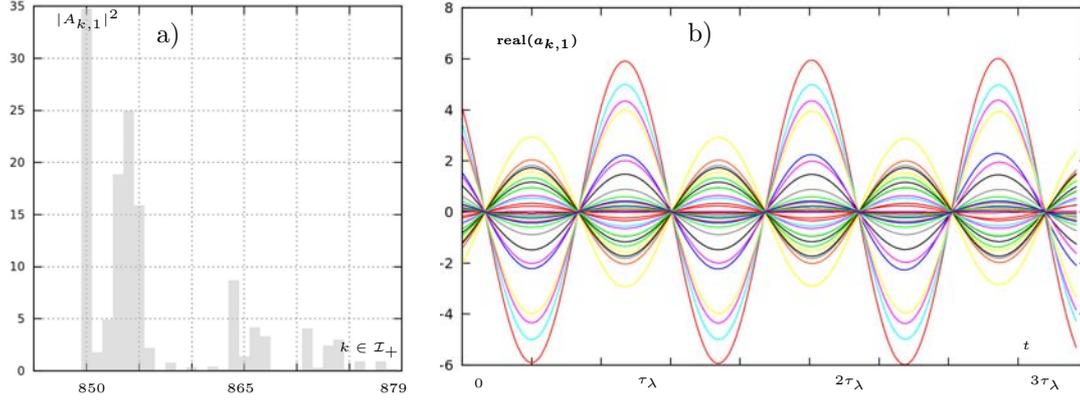


Figura 4.11: Ejemplo 6 (Red tridimensional, Ribozima): a) Distribución de la energía para los modos $k \in \mathcal{I}_+$ obtenidos con el método del gradiente (descendente) con los parámetros $k_2 = 1$, $k_4 = 1$ y $\mathcal{P} = 85.50$. b) Evolución de a_k , $k \in \mathcal{I}_+$ utilizando como condición inicial la distribución de modos $|A_{k,1}|^2$ correspondiente al caso $k_4 = 1.0$.

Utilizando como condiciones iniciales las determinadas por los puntos extremos de la energía, se puede integrar numéricamente el conjunto de ecuaciones de movimiento (4.42) para $\tilde{\mathcal{H}}_+$ con $k \in \mathcal{I}_+$ y los parámetros $k_2 = k_4 = m = 1$. La integración se hizo utilizando el método RK4 y se aplicó para el ejemplo de la cadena con una región de aglomeración. En las Figuras 4.9, 4.10 y 4.11 (b) se muestra la evolución del sistema durante un tiempo $\tau = n \frac{2\pi}{\lambda}$ con $n \in \mathbb{N}$. Se puede notar que la parte real de los modos oscila con la misma frecuencia λ_{\min} para cada ejemplo (para λ_{\max} ocurre algo análogo). Esta es la verificación numérica de la existencia de soluciones tipo breather en V_+ para el Hamiltoniano $\tilde{\mathcal{H}}_+$.

Las órbitas periódicas encontradas con el método del gradiente (ascenso/descenso) existen en extremos locales, de las hipersuperficies de energía y se espera que sean orbitalmente estables en el espacio invariante V_+ . En la siguiente sección se presenta el análisis de estabilidad lineal para este tipo de soluciones.

4.5. Estabilidad lineal de las soluciones oscilatorias

Se estudia la estabilidad lineal de la solución oscilatorias o tipo breathers $e^{-i\lambda t} A_k$, $k \in \mathcal{I}_+$ del sistema con Hamiltoniano $\tilde{\mathcal{H}}_+$ de (4.96). En el caso $\{A_k\}_{k \in \mathcal{I}_+}$ máx o mín de la subsección 4.4.1 se espera estabilidad lineal ya que las soluciones fueron determinadas en un extremo local de la hipersuperficie de energía. El formalismo que se presenta a continuación es válido para otras soluciones oscilatorias, es decir, no solo a las correspondientes al máx, mín de la energía. El hecho que las soluciones periódicas son equilibrios relativos, se utiliza para simplificar el análisis. En particular, si las soluciones son de la forma $a(t) = e^{-i\lambda t} b(t)$ entonces, si $b_i = A_i \forall i \in \mathcal{I}_+$, es un punto fijo de la ecuación para $b(t)$. La linealización para $b(t)$ es por lo tanto un sistema autónomo.

Sea el sistema de EDO

$$\dot{a} = f(a), \text{ en el subespacio invariante } V_+ \quad (4.83)$$

y sea $\gamma(t)$ una órbita periódica. De esta forma, para estudiar la estabilidad de trayectorias cercanas se expresa

$$a_{k,d}(t) = \gamma(t)_{k,d} + v_{k,d}(t), \quad k \in \mathcal{I}_+, d \in [1, D], \quad (4.84)$$

donde $v_{k,d}(t)$ es un termino de perturbación, usando (4.83)

$$\dot{\gamma}_{k,d}(t) + \dot{v}_{k,d}(t) = f(\gamma_{k,d}(t)) + Df(\gamma_{k,d}(t))v_{k,d}(t) + O(v_{k,d}^2(t)), \quad (4.85)$$

y usando $\dot{\gamma}_{k,d}(t) = f(\gamma_{k,d}(t))$, tomando los términos a primer orden en (4.85) se tiene:

$$\dot{v}_{k,d}(t) = Df(\gamma_{k,d}(t))v_{k,d}(t). \quad (4.86)$$

La ecuación (4.86) se denomina, ecuación variacional. Considerando ahora el caso

$$\dot{a}_{k,d} = f(a) = i \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}_+}{\partial a_{k,d}^*}, \quad \text{y } \gamma_{k,d}(t) = e^{-i\lambda t} A_{k,d}, \quad (4.87)$$

entonces, lo que se va a mostrar en las siguientes lineas es que el estudio de la linealización alrededor de la órbita periódica $\gamma_{k,d}(t)$ se puede reducir a una ecuación autónoma. De esta manera, para el caso de la forma normal (4.43) es conveniente primero expresar una solución arbitraria de (4.83) como

$$a_{k,d}(t) = e^{-i\lambda t} b_{k,d}(t) \Rightarrow b_{k,d}(t) = e^{i\lambda t} a_{k,d}(t), \quad (4.88)$$

por lo tanto

$$\dot{b}_{k,d} = i\lambda e^{i\lambda t} a_{k,d} + e^{i\lambda t} \dot{a}_{k,d}, \quad (4.89)$$

sustituyendo $\dot{a}_{k,d}$ de la ecuación (4.80) se tiene

$$\begin{aligned} \dot{b}_{k,d} = & i\lambda e^{i\lambda t} a_{k,d} + e^{i\lambda t} \left\{ -i\omega_k a_{k,d} - i \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} a_{k_1, d_1} a_{k_2, d_2} a_{k_4, d_2}^* \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} a_{k_1} a_{k_2} a_{k_3}^* \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.90)$$

identificando en la expresión anterior la definición para $b_{k,d}$, se tiene

$$\begin{aligned} \dot{b}_{k,d} = & i(\lambda - \omega_k) b_{k,d} - i \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} b_{k_1, d_1} b_{k_2, d_2} b_{k_4, d_2}^* \right. \\ & \left. + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} b_{k_1, d_1} b_{k_2, d_1} b_{k_3, d_2}^* \right], \end{aligned} \quad (4.91)$$

como $A_{k,d}$ es un punto fijo, se expresa $b_{k,d}$ como una perturbación,

$$b_{k,d} = A_{k,d} + v_{k,d} \Rightarrow \dot{b}_{k,d} = \dot{v}_{k,d}, \quad (4.92)$$

sustituyendo $v_{k,d}$ y $\dot{v}_{k,d}$ en la ecuación (4.91)

$$\begin{aligned} \dot{v}_{k,d} = & i(\lambda - \omega_k) v_{k,d} + i(\lambda - \omega_k) A_{k,d} \\ & - i \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (A_{k_1, d_1} + v_{k_1, d_1}) (A_{k_2, d_1} + v_{k_2, d_1}) (A_{k_4, d_2}^* + v_{k_4, d_2}^*) \right. \\ & \left. + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (A_{k_1, d_1} + v_{k_1, d_1}) (A_{k_2, d_1} + v_{k_2, d_1}) (A_{k_3, d_2}^* + v_{k_3, d_2}^*) \right]. \end{aligned} \quad (4.93)$$

Al simplificar y truncar la ecuación (4.93) a orden lineal en $v_{k,d}$ se tiene

$$\begin{aligned}
\dot{v}_{k,d} &= i(\lambda - \omega_k)A_{k,d} \\
&- i\frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_4} A_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} A_{k_4, d_2}^* + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3} A_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} A_{k_3, d_2}^* \right] \\
&+ i(\lambda - \omega_k)v_k - i\frac{3k_4}{2} \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_4} (v_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} A_{k_4, d_2}^* + A_{k_1, d_1}) v_{k_2, d_1} A_{k_4, d_2}^* + A_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} v_{k_4, d_2}^* \right. \\
&+ \left. \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3} (v_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} A_{k_3, d_2}^* + A_{k_1, d_1} v_{k_2, d_1} A_{k_3, d_2}^* + A_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} v_{k_3, d_2}^*) \right]. \quad (4.94)
\end{aligned}$$

El primer renglón de la ecuación (4.94) satisface la ecuación (4.81), por lo tanto la expresión para \dot{v}_k se simplifica como se indica

$$\begin{aligned}
\dot{v}_{k,d} &= i(\lambda - \omega_k)v_{k,d} \\
&- i\frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_4} (v_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} A_{k_4, d_2}^* + A_{k_1, d_1} v_{k_2, d_1} A_{k_4, d_2}^* + A_{k_1, d_1} A_{k_2, d_2} v_{k_4, d_2}^*) \right. \\
&+ \left. \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3} (v_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} A_{k_3, d_2}^* + A_{k_1, d_1} v_{k_2, d_1} A_{k_3, d_2}^* + A_{k_1, d_1} A_{k_2, d_1} v_{k_3, d_2}^*) \right]. \quad (4.95)
\end{aligned}$$

La ecuación (4.95) se puede expresar en términos de sus componentes reales e imaginarias, para ellos se hacen los siguientes cambios de variable

$$A_{k,d} = Q_{k,d} + iP_{k,d}, \quad (4.96)$$

$$v_{k,d} = q_{k,d} + ip_{k,d}. \quad (4.97)$$

El cálculo y la simplificación de esta separación se muestra en el apéndice (A), teniendo por resultado final la expresión

$$\begin{pmatrix} \dot{q}_k \\ \dot{p}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & \mathbb{O} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{B} & \mathcal{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_k \\ p_k \end{pmatrix}, \forall d = 1 \dots D, \quad (4.98)$$

donde \mathbb{O} , \mathbb{I} , \mathcal{A} , \mathcal{B} y \mathcal{C} son matrices de tamaño $n_1 \times n_1$ con $n_1 = \dim\{\mathcal{I}_+\}$ y los elementos de las matrices están determinados como

$$\mathcal{A}_{kl} = (\lambda - \omega_k)\delta_{kl} - 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{s_1, s_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k l s_1 s_2} (3Q_{s_1, d_1} Q_{s_2, d_2} + P_{s_1, d_1} P_{s_2, d_2}), \quad (4.99)$$

$$\mathcal{B}_{kl} = 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{s_1, s_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k l s_1 s_2} (3Q_{s_2, d_2} P_{s_1, d_1} - Q_{s_1, d_1} P_{s_2, d_2}), \quad (4.100)$$

$$\mathcal{C}_{kl} = (\lambda - \omega_k)\delta_{kl} - 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{s_1, s_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k l s_1 s_2} (Q_{s_1, d_1} Q_{s_2, d_2} + 3P_{s_1, d_1} P_{s_2, d_2}). \quad (4.101)$$

Un aspecto adicional en las ecuaciones (4.99), (4.100) y (4.101) es la simetría ante permutaciones de índices, ya que por ejemplo $\mathcal{A}_{kl} = \mathcal{A}_{lk}$, esencialmente debido a que $\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3} = \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 l k}$.

Utilizando el resultado analítico de la ecuación (4.98) para diferentes configuraciones de partículas, se puede estudiar el espectro de la matriz que aparece en dicha ecuación, como se muestra a continuación.

Análisis para ejemplo 2 de la sección 3.2 que corresponde con una cadena unidimensional con una aglomeración fuera del centro. En la figura 4.12 a) se muestra una representación gráfica para la matriz (4.98) correspondiente a este ejemplo. En la parte b) de la misma figura se muestran la localización de los valores propios en el plano complejo.

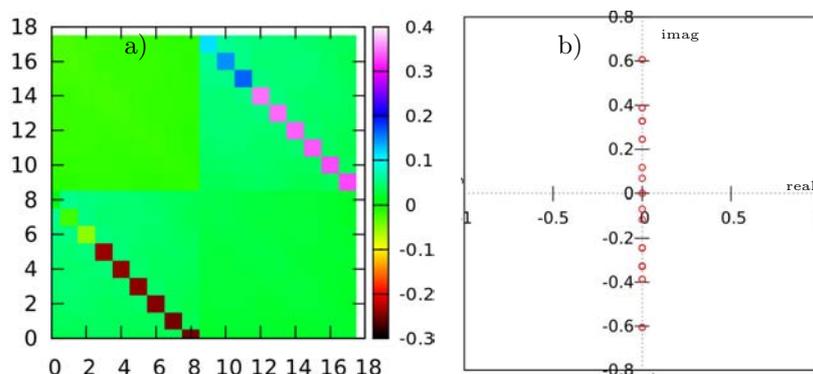


Figura 4.12: Ejemplo 2 de la sección 3.2 (Cadena con una aglomeración), $k_4 = 1.0$: a) Representación gráfica de la matriz de la ecuación (4.98). b) Localización de los valores propios en el plano complejo para la misma matriz.

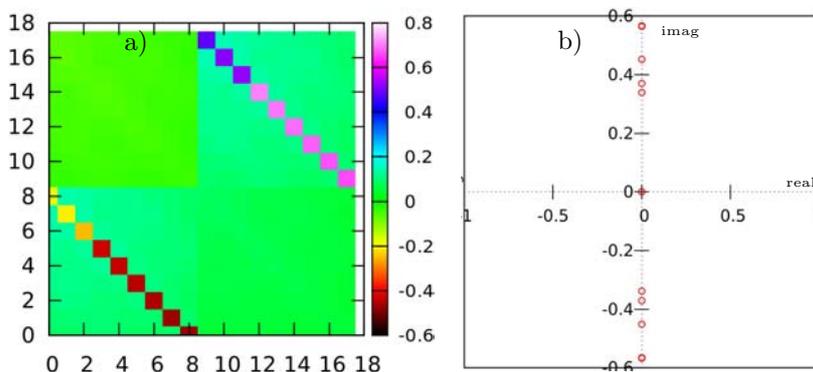


Figura 4.13: Ejemplo 2 de la sección 3.2 (Cadena unidimensional con una aglomeración), $k_4 = 2.5$: a) Representación gráfica de la matriz de la ecuación (4.98). b) Localización de los valores propios en el plano complejo.

El siguiente ejemplo corresponde con el ejemplo 3 de la sección 3.2 (una cadena unidimensional con dos regiones de aglomeración), en la gráfica 4.14 a) se muestra una representación gráfica de la matriz (4.98), en la parte b) se muestra la localización de los valores propios en el plano complejo.

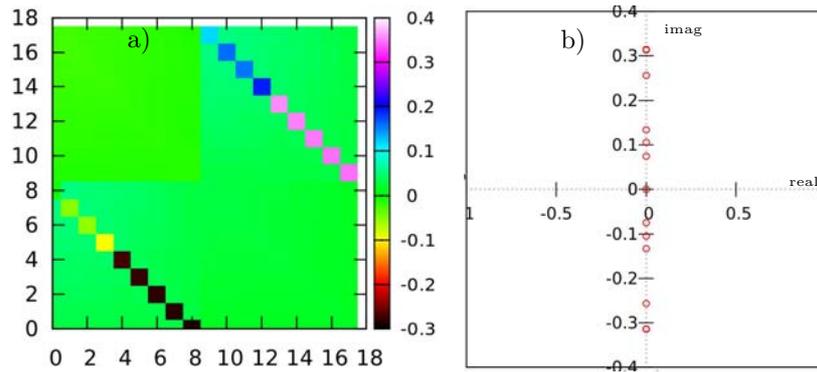


Figura 4.14: Ejemplo 2 de la sección 3.2 (Cadena unidimensional con dos regiones de aglomeración), $k_4 = 1.0$: a) Representación gráfica para la matriz (4.98). b) Localización de los valores propios en el plano complejo.

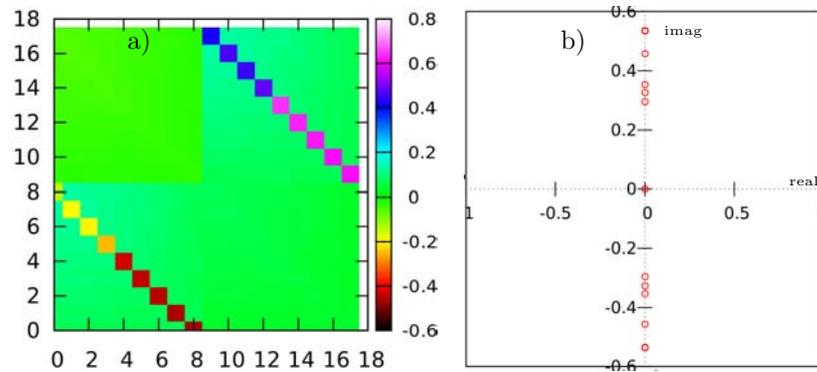


Figura 4.15: Ejemplo 2 de la sección 3.2 (Cadena unidimensional con dos regiones de aglomeración), $k_4 = 2.5$: a) Representación gráfica de la matriz (4.98). b) Localización de los valores propios en el plano complejo.

En la figura 4.16 se muestra la matriz (4.98) correspondiente al ejemplo 8 de la sección 3.2 (red molecular tridimensional Ribozima). La variedad invariante esta formada por los 20 modos de vibración mas altos, se utilizo $k_4 = 1.0$. En la figura 4.17 se muestra el mismo ejemplo, pero utilizando $k_4 = 2.5$, al igual que en los ejemplos anteriores se observa un aumento en la dispersión de la parte imaginaria de los valores propios de la matriz (4.98).

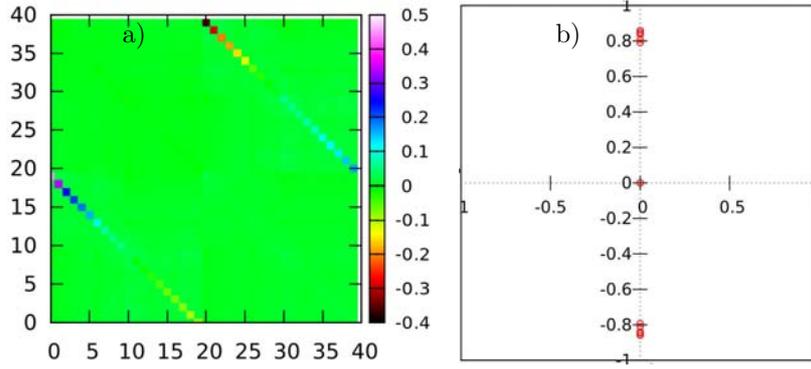


Figura 4.16: Ejemplo 2 de la sección 3.2 (red tridimensional Ribozima), $k_4 = 1.0$ y $\lambda_{\text{máx}} = 5.92206$: a) Representación gráfica de la matriz (4.98). b) Localización de los valores propios en el plano complejo.

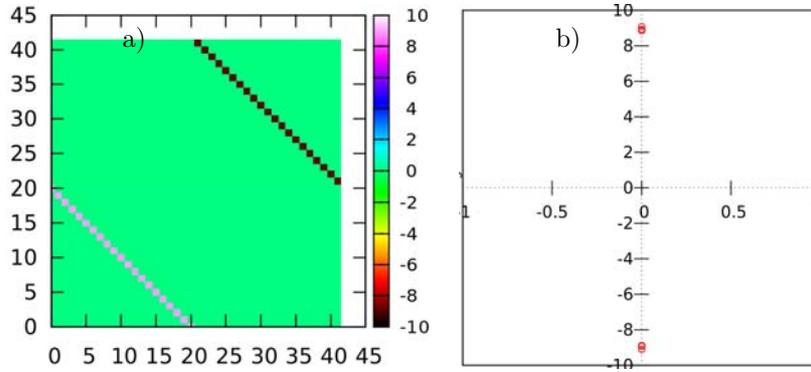


Figura 4.17: Ejemplo 2 de la sección 3.2 (red tridimensional Ribozima), $k_4 = 2.5$ y $\lambda_{\text{max}} = 6.02534$: a) Representación gráfica de la matriz (4.98). b) Localización de los valores propios en el plano complejo.

En todos los ejemplos se encuentra numéricamente que los valores propios de la matriz de estabilidad lineal (4.98) son puramente imaginarios, incluyendo dos valores propios cero para diferentes valores de k_4 , esto se extiende al ejemplo tridimensional (ribozima). Este experimento se llevo hasta $k_4 \approx O(10^2)$ con distintas configuraciones y continuo la misma tendencia, es decir aumenta la dispersión de los valores propios. Con estas observaciones numéricas se tiene que las soluciones oscilatorias son estables dentro del subespacio de modos \mathcal{I}_+ , restringidos a la hipersfera de radio $\mathcal{P} = C$.

Las soluciones tipo breather son validas para $\bar{\mathcal{H}}_+$. La estabilidad en el espacio fase que incluye a todos los modos a_l , $l \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m \cup \mathcal{I}_+$, no se ha estudiado hasta el momento. Es posible que estas soluciones sean inestables en el espacio fase completo. Este análisis es un problema abierto para un trabajo futuro. Sin embargo, en el capítulo siguiente se presenta un estudio *heurístico* de la estabilidad de las condiciones iniciales cercanas a órbitas periódicas de esta sección, utilizando herramientas de integración numérica.

Capítulo 5

Integración numérica, localización y estabilidad

En este capítulo se presenta la evolución numérica de algunas configuraciones utilizando diferentes condiciones iniciales. La motivación es complementar las observaciones analíticas y numéricas de los capítulos anteriores, como es el caso de la localización espacial para modos en \mathcal{I}_+ . Una pregunta que se puede plantear en este momento es, ¿la localización espacial para interacciones lineales observada en el capítulo 3 para diferentes ejemplos persiste en el tiempo al incorporar la parte no lineal? Preguntas similares se pueden plantear respecto a la energía y la periodicidad de las soluciones. La manera de obtener una respuesta aproximada es mediante la integración numérica de las ecuaciones de movimiento (4.41), existen diferentes métodos cada uno con atributos diferentes, pero también con requerimientos técnicos específicos.

Se plantea un conjunto de condiciones iniciales para cada uno de los ejemplos del capítulo 3. En todos los ejemplos se hacen cuatro integraciones, cada una correspondiente a una condición inicial. El caso (a) que representa la primer condición inicial, corresponde con haber elegido una distribución de energía donde se le imprime energía a todos los modos $|A_{l,d}|^2$, $l \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m \cup \mathcal{I}_+$, $d \in [1, D]$, cada modo tiene diferente energía. El objetivo de este experimento es monitorear si existen regiones en el espacio de modos donde eventualmente se acumula energía o si existen flujos de la misma de una región a otra. La condición inicial (b), al igual que la anterior, se le asigna energía a todos los modos $|A_{l,d}|^2$, $l \in \mathcal{I}_- \cup \mathcal{I}_m \cup \mathcal{I}_+$, $d \in [1, D]$, pero con la diferencia que ahora es la misma para todos los modos. El objetivo del experimento es comparar las observaciones con el anterior, es decir, poder evaluar si asignar mayor o menor energía en algunos modos puede ejercer influencia en el estado final de la integración. El caso (c) corresponde con asignar energía únicamente a los modos bajos $|A_{l,d}|^2$, $l \in \mathcal{I}_-$, $d \in [1, D]$, el objetivo de este experimento es monitorear si a lo largo del ciclo de integración la energía permanece en el subespacio formado por los modos bajos V_- o eventualmente se traslada a otra región. La integración del caso (d) corresponde con asignar energía únicamente a los modos altos $|A_{l,d}|^2$, $l \in \mathcal{I}_+$, $d \in [1, D]$, el objetivo es comparar con los resultados analíticos del capítulo 4. Los resultados se van describiendo con detalle para cada una de las integraciones.

Antes de iniciar, propiamente con la integración, se exploran tres métodos, con la finalidad de elegir el que ofrece los mejores resultados en un tiempo “razonable”. El primer método empleado es Runge-Kutta de cuarto orden (RK4) explícito, el segundo método es Störmer-Verlet semiexplícito que corresponde al método Verlet con un paso intermedio en la velocidad y el tercero es un método de integración simpléctica

de cuarto orden PEFRL. La implementación se hizo en *C++* debido a su diseño modular y funciones disponibles en su versión estándar, esto adicional a la portabilidad y la ventaja de optimizar la arquitectura.

Las ecuaciones sobre las que se implementan los métodos numéricos son

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N |\mathbf{p}_i|^2 + \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_2}{2} |(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)|^2 + \sum_{i,j=1}^N c_{ij} \frac{k_4}{4} |(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)|^4,$$

$$\dot{q}_{k,d} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_{k,d}} = f_{1k,d}(q_{1,1}, q_{2,1} \dots q_{k,D} \dots q_{N,D}, p_{1,1}, p_{2,1} \dots p_{k,D} \dots p_{N,D}), \quad (5.1)$$

$$\dot{p}_{k,d} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_{k,d}} = f_{2k,d}(q_{1,1}, q_{2,1} \dots q_{k,D} \dots q_{N,D}, p_{1,1}, p_{2,2} \dots p_{k,D} \dots p_{N,D}). \quad (5.2)$$

Es necesario calcular f_1 y f_2 , utilizando la descomposición de la definición 2.28 para los vectores $\mathbf{q}_i = (q_{i,1}, q_{i,2} \dots q_{i,D})$ y $\mathbf{p}_i = (p_{i,1}, p_{i,2} \dots p_{i,D})$

Se hace uso de

$$f_{1k,d} = \frac{1}{m} p_{k,d}, \quad (5.3)$$

$$f_{2k,d} = -k_2 \sum_{j \neq k}^N c_{kj} (q_{k,d} - q_{j,d}) + \sum_{i \neq k}^N c_{ik} (q_{k,d} - q_{i,d})$$

$$-k_4 \sum_{j \neq k}^N c_{kj} |\mathbf{q}_k - \mathbf{q}_j|^2 (q_{k,d} - q_{j,d}) + k_4 \sum_{i \neq k}^N c_{ik} |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_k|^2 (q_{i,d} - q_{k,d}). \quad (5.4)$$

para determinar la fuerza a partir de las ecuaciones de Hamilton.

La razón para elegir las variables \mathbf{q} y \mathbf{p} es para evitar el cálculo de los coeficientes $\Gamma_{k_1 k_2 k_3 k_4}$ de (2.46) y los coeficientes $\tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k_4}$ de (2.77) de las variables $a_{i,d}$, $a_{i,d}^*$ del espacio de Fourier. Aunque el valor de estos coeficientes es constante en el tiempo y tienen simetrías ante permutaciones de índices, aun así resultan muy costosos en tiempo de computo y memoria (la cantidad de índices es $N^4/24$, ya tomando en cuenta las simetrías). En cambio, integrar las ecuaciones de movimiento (5.1), (5.2) y elegir algunos pasos cada determinado tiempo para monitorear la evolución de la energía y el momento es mucho más rápido.

5.1. Métodos de integración

A continuación se presenta una breve descripción de aspectos generales de cada uno de los métodos de integración implementados en este trabajo. Pero sobre todo, se incluyen las referencias para la consulta de aspectos más detallados.

5.1.1. Método de Runge Kutta

El método de Runge-Kutta [71], [72] (RK) pertenece a una familia de métodos desarrollados a principios del siglo XX por C. Runge y W. Kutta [73], tienen la particularidad de hacer cálculos intermedios para las pendientes de la solución aproximada de la ecuación diferencial, es decir, dada una ecuación diferencial ordinaria

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = A(t, \mathbf{x}), \quad (5.5)$$

$$(5.6)$$

con condición inicial

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0. \quad (5.7)$$

y $A \in \Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ con Ω un conjunto abierto, el método RK de orden S permite aproximar la solución en el punto $(t + \Delta t, \mathbf{x}_{n+1})$ con un orden de aproximación S , mediante la expresión

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \Delta t \sum_s^S b_s \mathbf{k}_s, \quad (5.8)$$

donde \mathbf{k}_i se determina

$$\mathbf{k}_i = A\left(t + \Delta t c_i, \mathbf{x}_n + \Delta t \sum_j^S a_{ij} \mathbf{k}_j\right), \quad (5.9)$$

los coeficientes c_i , b_s y a_{ij} , dependen del orden del método. De manera particular el Método de Runge Kutta toma la forma de la ecuación

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \frac{\Delta t}{6} (\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) + O(\Delta t^5). \quad (5.10)$$

donde, para el cuarto orden (RK4) resulta

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= A(t, \mathbf{x}_n), \\ \mathbf{k}_2 &= A\left(t + \frac{1}{2}\Delta t, \mathbf{x}_n + \frac{1}{2}k_1\Delta t\right), \\ \mathbf{k}_3 &= A\left(t + \frac{1}{2}\Delta t, \mathbf{x}_n + \frac{1}{2}k_2\Delta t\right), \\ \mathbf{k}_4 &= A(t + \Delta t, \mathbf{x}_n + k_3\Delta t). \end{aligned}$$

El orden del error acumulado es $O(\Delta t^4)$. La ecuación diferencial y la condición inicial son las ecuaciones (5.5) y (5.7), y $\Delta t \in \mathbb{R}$ es el paso de integración.

(RK4) es un método de integración sencillo de implementar, y con un paso suficientemente pequeño, (el criterio es que debe ser a lo mas 1/4 del periodo mas pequeño [74]) y mantiene una variación de la energía por debajo de $O(10^{-5})$, como se muestra en la sección 5.2.

5.1.2. Implementación de Störmer-Verlet

Este método es muy utilizado en dinámica molecular para modelar potenciales de Lennard-Jones [75], [76], proviene de hacer una expansión en series de Taylor en el tiempo Δt , como se explica a continuación.

Sea el sistema $\ddot{\mathbf{x}} = -A(\mathbf{x})$ con $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$, dados los vectores \mathbf{x}_n y \mathbf{v}_n de posición y velocidad al tiempo t , entonces los vectores \mathbf{x}_{n+1} , \mathbf{v}_{n+1} de posición y velocidad al tiempo $t + \Delta t$ están determinados por

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_n + \mathbf{a}_n \Delta t, \\ \mathbf{x}_{n+1} &= \mathbf{x}_n + \mathbf{v}_n \Delta t + \frac{1}{2} \mathbf{a}_n (\Delta t)^2,\end{aligned}$$

donde

$$\mathbf{a}_n = -A(\mathbf{x}_n),$$

es la aceleración con $A(x_n)$ la fuerza que esta determinada por las propiedades de cada problema. En el método Störmer-Verlet se utiliza un paso adicional en el cual se calcula un paso intermedio de velocidad

$$\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{v}_n + \frac{1}{2} \mathbf{a}_n \Delta t,$$

de esta forma, la posición \mathbf{x}_{n+1} se determina por

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + v_{n+\frac{1}{2}} \Delta t, \quad (5.11)$$

y los vectores

$$\mathbf{a}_{n+1} = -A(\mathbf{x}_{n+1}), \quad \text{y } \mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \mathbf{a}_{n+1} \Delta t. \quad (5.12)$$

Este método se utilizo para integrar el sistema completo en las variables de posición y momento \mathbf{q} y \mathbf{p} . Es un método que solo hace un cálculo intermedio, eso lo vuelve muy rápido comparado con RK4 y con el simpléctico PEFRL (le toma alrededor de 1/8 de tiempo en hacer la misma integración), pero las variaciones en energía son más altas que con los dos anteriores, para el mismo paso. Este método es útil para explorar de manera rápida algunas evoluciones de problemas de muchas partículas. Störmer-Verlet es un método simpléctico de integración (preserva la forma del espacio fase a ese orden), con orden de error $O(\Delta t^2)$.

5.1.3. Método Simpléctico PEFRL

Un método simpléctico tiene la ventaja de preservar la estructura simpléctica del espacio fase. Este tipo de métodos estan basados en el hecho de que una discretización del flujo Hamiltoniano puede funcionar como una transformación simpléctica si es lo suficientemente refinada [77], [78]. Algunos de los pioneros en abordar el estudio de los métodos simplécticos de integración fueron Vogelaere (1956), Ruth (1983) y Feng Kang (1985) [79]. En particular el método simpléctico utilizado en este trabajo es el denominado PEFRL (Position Extended Forest-Ruth Like) [80], el cual se presenta a continuación.

Sea el sistema $\ddot{\mathbf{x}} = -A(\mathbf{x})$ con $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$, dados los vectores \mathbf{x}_n y \mathbf{v}_n y de posición y velocidad al tiempo t , entonces, los vectores \mathbf{x}_{n+1} , \mathbf{v}_{n+1} de posición y velocidad al tiempo $t + \Delta t$ se obtiene como sigue:

Utilizando los resultados de [39] se definen las constantes escalares

$$\begin{aligned}\xi &= +0.1786178958448091 \times 10^0, \\ \lambda &= -0.2123418310626054 \times 10^0, \\ \chi &= -0.6626458266981849 \times 10^{-1},\end{aligned}$$

se define además

$$\mathbf{x}_{n+1/5} = \mathbf{x}_n + \xi \Delta t \mathbf{v}_n.$$

Calculando la aceleración con el Hamiltoniano, se interpola la velocidad un paso

$$\mathbf{v}_{n+1/4} = \mathbf{v}_n + (1 - 2\lambda) \frac{\Delta t}{2} A(\mathbf{x}_{n+1/5}).$$

Inicia el segundo paso, se calcula nuevamente la posición con el peso indicado

$$\mathbf{x}_{n+2/5} = \mathbf{x}_{n+1/5} + \chi \Delta t \mathbf{v}_{n+1/4}.$$

Se interpola la velocidad en un segundo paso

$$\mathbf{v}_{n+1/2} = \mathbf{v}_{n+1/4} + \lambda \Delta t A(\mathbf{x}_{n+2/5}).$$

Se hace un tercer paso, para interpolar la posición

$$\mathbf{x}_{n+3/5} = \mathbf{x}_{n+2/5} + (1 - 2(\chi + \xi)) \Delta t \mathbf{v}_{n+1/2},$$

para la velocidad también se interpola utilizando el peso indicado

$$\mathbf{v}_{n+3/4} = \mathbf{v}_{n+1/2} + \lambda \Delta t A(\mathbf{x}_{n+3/5}).$$

La posición se precisa por cuarta vez

$$\mathbf{x}_{n+4/5} = \mathbf{x}_{n+3/5} + \chi \Delta t \mathbf{v}_{n+3/4},$$

la velocidad se calcula nuevamente

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_{n+3/4} + (1 - 2\lambda) \frac{\Delta t}{2} A(\mathbf{x}_{n+4/5}).$$

Por último se obtiene nuevamente la evaluación de la posición

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_{n+4/5} + \xi \Delta t \mathbf{v}_{n+1}.$$

PEFRL es un método de cuatro evaluaciones para la velocidad y cinco para la posición. De manera adicional este método es marginalmente más rápido que RK4.

5.2. Precisión y calibración

Para realizar las pruebas numéricas se utiliza el **Ejemplo 1** (Cadena unidimensional sin regiones de aglomeración) y se toman en cuenta únicamente interacciones entre primeros vecinos, que es el caso de la cadena FPU clásica [33]. La razón para utilizar este ejemplo es que existen muchos resultados de integración numérica para este caso [81], [82], [83]. En esta sección se muestra una comparación entre los métodos numéricos RK4, Störmer-Verlet y PEFRL.

5.2.1. Prueba de conservación de la energía y el momento para los tres métodos

Tener confianza en que el método implementado conserva la energía y el momento (como se muestra en el capítulo 2) a un determinado orden, que esta en función del tamaño de paso, es crucial para poder integrar largos periodos de tiempo y tener certeza de que las desviaciones de las trayectorias de las partículas permanecen acotadas en un umbral aceptable. Cada método tiene su propio criterio para escoger el tamaño de paso, sin embargo todos coinciden en que sea un submúltiplo del periodo más pequeño, por lo tanto en estas pruebas se utilizará el mínimo que es $h = \pi/8\omega_{max}$. En las figuras 5.1, 5.2 y 5.3, se muestran los resultados de conservación de energía y momento, para los métodos RK4, Störmer-Verlet y PEFRL, respectivamente.

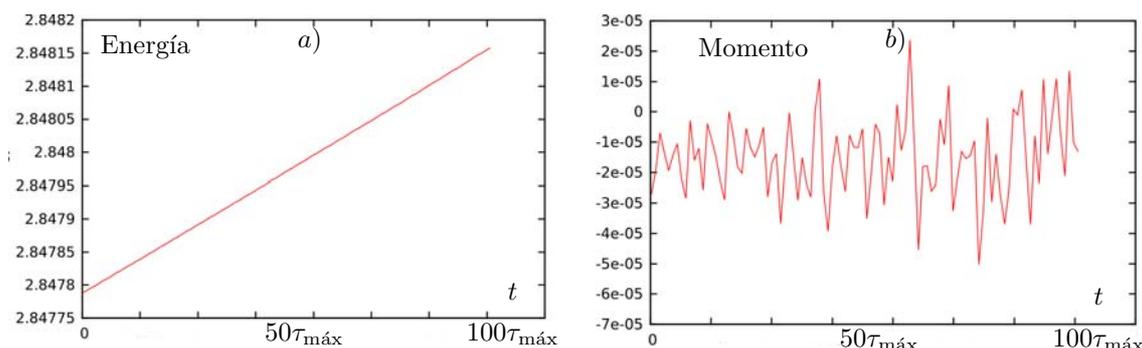


Figura 5.1: a) Evolución de la energía de la cadena homogénea integrada con RK4 durante un tiempo $100\tau_{m\acute{a}x}$, con $\tau_{max} = 2\pi/\omega_{min}$, el paso de integración es $h = \pi/8\omega_{max}$. Se puede apreciar como la energía se incrementa en una cantidad del orden de 10^{-3} después de $100\tau_{m\acute{a}x}$. b) Evolución del momento lineal de la cadena durante el mismo período de tiempo.

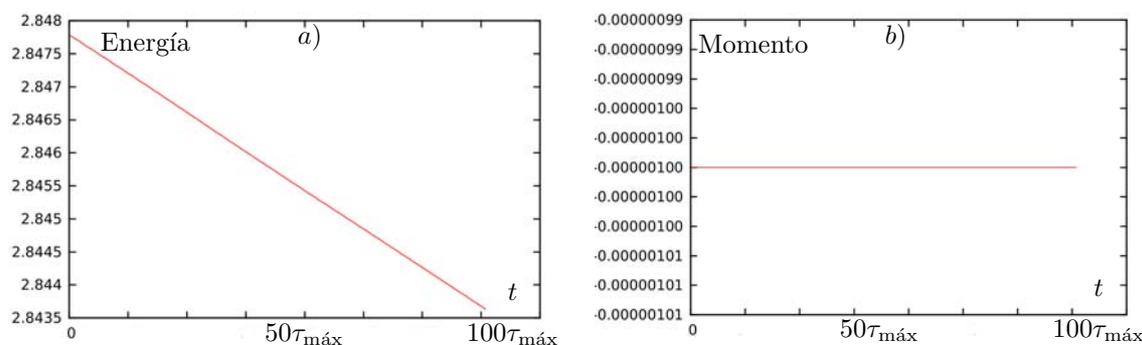


Figura 5.2: a) Evolución de la energía de la cadena homogénea integrada con Störmer-Verlet durante un tiempo $100\tau_{m\acute{a}x}$ con $\tau_{m\acute{a}x} = 2\pi/\omega_{min}$, el paso de integración es h . Se observa que la energía se ha disipado en un orden de 10^{-2} . b) Evolución del momento lineal durante el mismo período de tiempo.

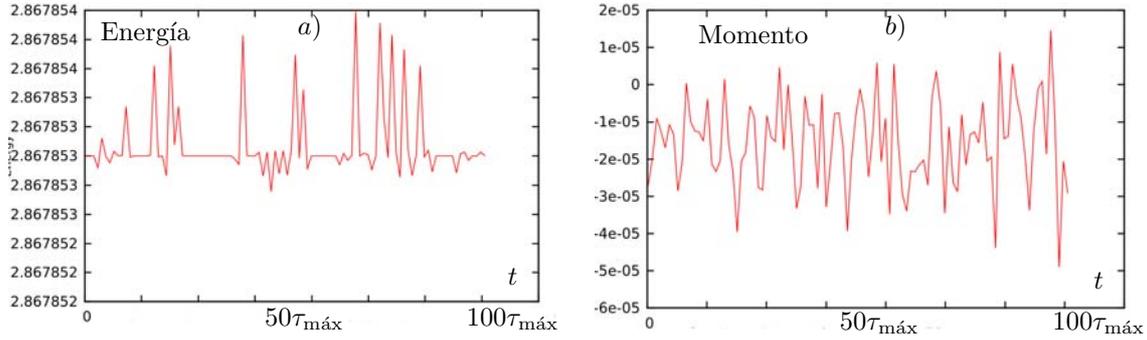


Figura 5.3: a) Evolución de la energía de la cadena homogénea integrada con PEFRL durante un tiempo $100\tau_{\text{máx}}$ con $\tau_{\text{max}} = 2\pi/\omega_{\text{min}}$, el paso de integración es h . Con este método hay variaciones del orden de 10^{-6} en la energía, pero si una tendencia al incremento/decreto. b) Evolución del momento lineal durante el mismo período de tiempo.

El primer método implementado es RK4, en las gráficas de la figura 5.1 se muestra la evolución de la energía y el momento respectivamente. El tiempo de integración es $100\tau_{\text{máx}}$, donde $\tau_{\text{máx}}$ el periodo mas largo de vibración determinado por el inverso de la frecuencia mas baja $\tau_{\text{max}} = 2\pi/\omega_{\text{min}}$ y el paso de integración esta determinado por un submúltiplo del período mas pequeño. En las gráficas de la figura 5.2 se muestra la evolución de la energía y el momento respectivamente utilizando el método Störmer-Verlet, para el caso de la cadena homogénea. El tiempo de integración y el paso corresponden a los mismos utilizados con RK4 y por último en las gráficas de la figura 5.3 se muestra la evolución de la energía y en la b) el momento, con los mismo paso y durante el mismo período que con los métodos anteriores. En la figura 5.3 se muestra la evolución, utilizando ahora el método simpléctico PEFRL.

De los resultados de las gráficas 5.1, 5.2 y 5.3 se hacen las siguientes observaciones:

1. El método RK4 después de un tiempo $\tau = 100\tau_{\text{máx}}$ utilizando el paso $h = \pi/8\omega_{\text{max}}$ ha incrementado la energía total del sistema en un orden de 10^{-3} que en términos comparativos, indica que el sistema ha ganado el 0.012 % respecto a la energía inicial. Para el momento las variaciones son del orden de 10^{-5} . No es el método que mejor conserva la energía y tampoco el mas rápido, sin embargo, es muy utilizado en muchos problemas de dinámica. Una mejora que se puede implementar, pero que ya no se hizo en este trabajo, es utilizar un paso variable.
2. El método Störmer-Verlet después de haber integrado el mismo tiempo $100\tau_{\text{máx}}$ con el paso h , ha disipado la energía una cantidad del orden de 10^{-2} que comparativamente equivale a 0.70 % menos energía que la inicial. En la parte del momento, este método es comparable a RK4, ya que las variaciones son del orden de 10^{-5} . Este método es el que tiene los más pobres resultados respecto a la conservación de la energía, sin embargo, como ya se menciona antes, es un método de integración muy rápido comparado con los otros dos, le toma alrededor de una 1/8 parte del tiempo de los otros métodos en integrar el mismo problema con las mismas condiciones numéricas.
3. El método PEFRL después de un tiempo de integración de $100\tau_{\text{máx}}$ ha tenido variaciones en la energía del orden de 10^{-6} , aunque a diferencia de los anteriores estas variaciones están acotadas en una franja con una anchura $\approx 10^{-6}$, si se toma la energía final de la integración y se compra en términos porcentuales con la inicial resulta haber obtenido un incremento de 1.74×10^{-5} . La

conservación del momento para este método es también del orden de 10^{-5} . Como ya se menciono antes, PEFRL a pesar de conservar mejor la energía que RK4, resulta también que el tiempo de integración es marginalmente menor a RK4.

A modo de comparación con algunos resultados de la literatura se muestra la gráfica 5.4. En la parte a) se presenta la evolución de energía para los primeros 5 modos, que corresponde con los el tipo de resultados mostrados en [33]. En la parte b) se muestra la energía por modos E_i con $i \in 1 \dots N$, experimento presentado en la referencia [83], utilizando la cadena con distribución homogénea, los cálculos se hicieron utilizando el método PEFRL. Los resultados numéricos para este ejemplo suelen enfocarse en la evolución de la energía para los primeros modos de vibración, dada una condición muy especial, donde solo se excita uno o dos de los primeros modos, pero los tiempos de evolución son del orden $10^4 \tau_{max}$, que es donde se visualizan los superciclos [33]. En la gráfica 5.4 el tiempo de integración corresponde únicamente a $1000 \tau_{m\acute{a}x}$, ya que la cadena de este ejemplo esta formada por $N = 100$ partículas, mientras que en los experimentos referidos en [33], donde $N = 16, 32$. Se tiene evidencia de localización espectral en los estudios realizados por Flach, para cadenas tipo FPU cuárticas [83] (β -FPU). Sin embargo, la localización espectral no tiene implicación obvia a la localización espacial.

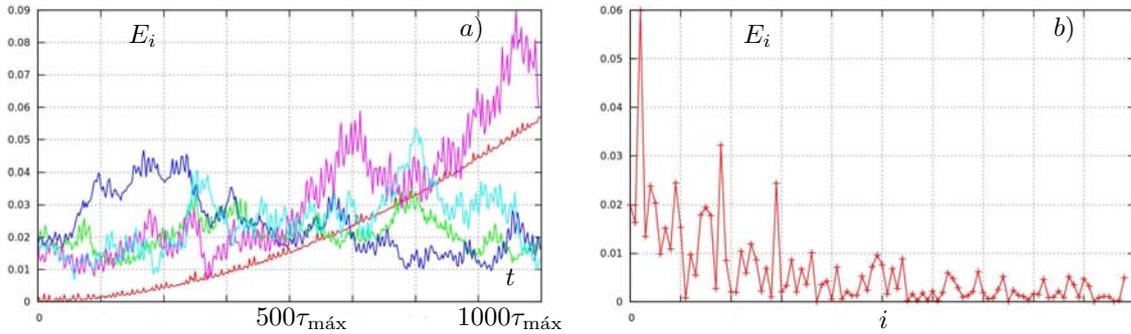


Figura 5.4: a) Evolución de la energía $E_i = |a_i|^2$ para los primeros 5 modos de vibración E_i con $i = 1, 2, 3, 4, 5$ durante un tiempo de $1000\tau_{m\acute{a}x}$. b) Energía final para cada modo después de integrar $1000\tau_{m\acute{a}x}$. Este cálculo se realizo con el método PEFRL.

Para este mismo ejemplo, la figura 5.5 muestra las condiciones iniciales y finales de los modos integradas un tiempo $100\tau_{m\acute{a}x}$ donde $\tau_{m\acute{a}x}$ corresponde al período mas largo. Son cuatro diferentes condiciones iniciales (curvas unidas por el símbolo $*$) y sobre la misma gráfica se presenta la condición final para cada una (curvas unidas con el símbolo \square). A continuación se hace una descripción de cada una de las condiciones iniciales.

- a) Se muestra la condición inicial en el espacio de los modos, correspondiente a una perturbación a las partículas de cada extremo de la cadena ($*$), sobre la misma gráfica se muestra el estado final de los modos después de un tiempo de integración $100\tau_{m\acute{a}x}$, donde $\tau_{m\acute{a}x}$ es periodo mas largo para esta configuración (\square). Se aprecia que algunos modos muy específicos han obtenido gran parte de la energía, mientras que la el resto de los modos han reducido su nivel de energía.
- b) En este caso la condición inicial es que todos los modos tienen exactamente la misma energía, al igual que el caso anterior, la energía se ha depositado preferentemente en algunos modos pero sin una preferencia por alguna región particular (alta/baja/media) del espacio de modos. Esta figura muestra

la aparición de *picos* o rápidas oscilaciones en casi todas las regiones del espectro, excepto en la parte baja, que tiene un comportamiento mas regular. Las oscilaciones son consecuencia de que el factor de traslape (2.81) esta jugando un papel importante en el intercambio de energía entre modos, perdiendo relevancia hacia la parte baja.

- c) Esta condición inicial consiste en excitar únicamente el primer 10% de los modos, se observa que la energía, aunque oscila entre los modos que han sido activados originalmente, permanece en la misma región de modos, esto resulta muy interesante para esta configuración por que indica la existencia de un fenómeno de localización robusto para esta región del espacio.
- d) Esta condición inicial corresponde a la calculada con el método del gradiente (ascenso/descenso) para $\bar{\mathcal{H}}_+$, es decir, se utilizó como condición inicial una solución tipo breather para la forma normal (ver ecuación (4.43) sección 4.4.1). Esta órbita periódica se puede pensar como una órbita del sistema \mathcal{H} , pero no esta garantizada su estabilidad en la teoría presentada en el capítulo 4. El espacio invariante \mathcal{I}_+ esta formado por modos que se especifican en cada ejemplo. Continuando con la descripción, se puede observar que después de la integración, una parte de la energía se ha trasladado hacia algunos modos bajos y el resto ha permanecido en los altos, al igual que el caso anterior tambien hay una persistencia de la energía pero ahora en la parte alta de los modos, lo cual nuevamente es evidencia de que la localización es un fenómeno robusto en esta región de modos.

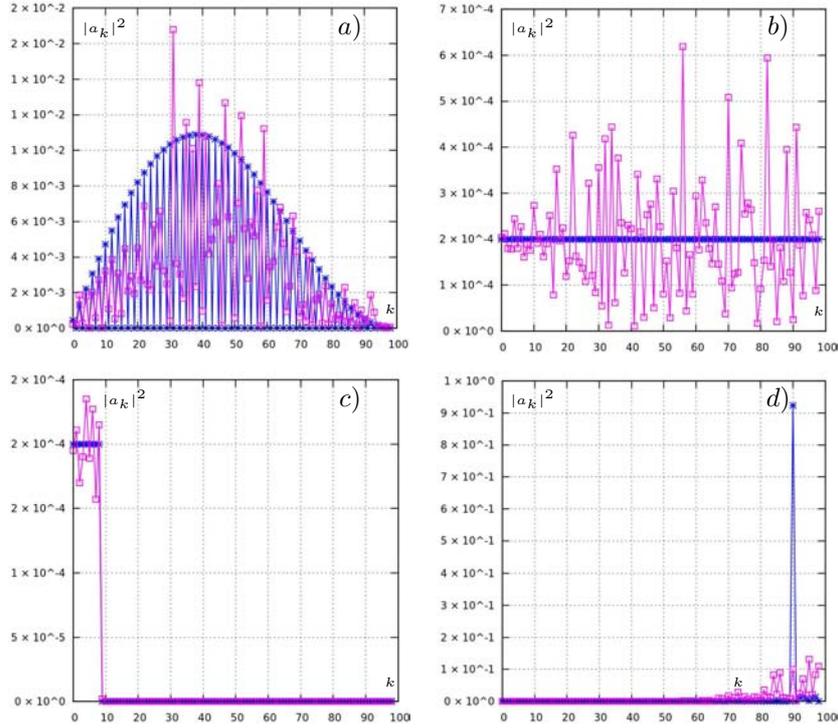


Figura 5.5: Condiciones iniciales (*) y finales (\square) para el ejemplo 1, tiempo de integración entre $[0, 100\tau_{\text{máx}}]$: a) Se perturban las partículas de los extremos. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente a los 10 modos de vibración mas bajos. d) Se utiliza la condición inicial obtenida con el método del gradiente (descenso).

La figura 5.6 muestra la distribución de la amplitud de los modos $|a_n|^2$ con $n = 1 \dots N$ para los cuatro casos de la figura 5.5.

- Se muestra la evolución espectral cuando la condición inicial es sacar cada una de las partículas de los extremos $0.1R_c$, se puede observar que la energía aunque oscila a lo largo de la integración, permanece en la región media del espacio de los modos, sin activar de manera relevante la zona baja.
- En este caso se asigna la misma energía en todos los modos de vibración, se observa que la energía se deposita en casi todo el espacio de los modos, pero lo hace de forma creciente hacia los modos altos, también se observa que la amplitud de los ciclos de oscilación de la energía en la parte alta del espacio de modos son mas lentos que los de las regiones medias, los modos de la parte baja tienden a preservar la cantidad de energía que les fue asignada en la condición inicial.
- La condición inicial es activar únicamente el 10% de los modos mas bajos, aunque la energía por modo esta cambiando en el tiempo, permanece localizada en la región delimitada por la condición inicial, No se activan modos vecinos a la región activada en la condición inicial, la energía persiste de manera robusta para los modos bajos.
- Se utilizó la condición inicial obtenida con el método del gradiente (descenso), la gráfica muestra que la energía aunque oscila para cada modo, permanece en la región delimitada por la condición inicial.

Sin embargo, a diferencia del caso anterior, donde hay pequeñas variaciones en la energía de los modos, aquí las variaciones son mucho más rápidas.

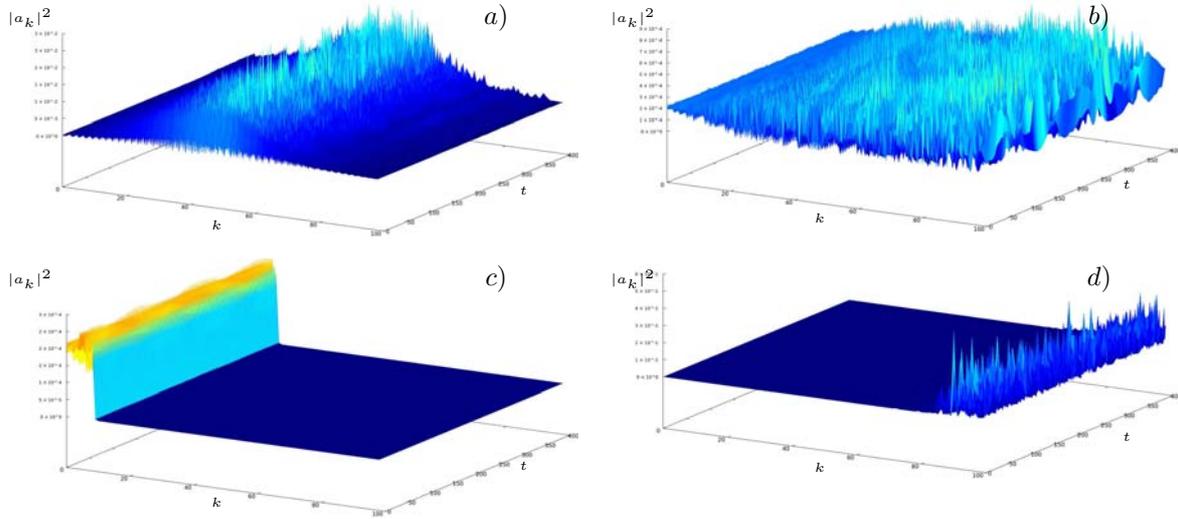


Figura 5.6: Resultados de la integración para el ejemplo 1, tiempo de integración entre $[0, 100\tau_{\text{máx}}]$. a) Las partículas de los extremos se sacan del equilibrio. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente al 10 % de los modos de vibración más bajos. d) Se utiliza la condición inicial obtenida con el método del gradiente (descenso).

La integración numérica para este ejemplo muestra varias cosas, la primera obtenida de las gráficas a) y b) de las figuras 5.5 y 5.6, es que la energía no tiene una preferencia definida por alguna región del espacio, sin embargo, de las observaciones c) y d), se tiene que si de manera artificial se activan únicamente la parte baja o alta del espectro, existe una persistencia en la localización de la energía sobre los modos activados en la condición inicial.

Esta configuración muestra que la localización en todas las diferentes regiones del espectro es un fenómeno robusto, aunque puede estar oscilando en el tiempo y cada modo puede intercambiar energía con algunos modos vecinos, los hace débilmente o incluso no lo hace como se observa en las gráficas de evolución de la figura 5.6.

5.3. Resultados numéricos

A continuación se presenta un conjunto de seis configuraciones de partículas, sobre las cuales se integra numéricamente para cuatro diferentes condiciones iniciales. Las configuraciones fueron seleccionadas, por considerar que cada una de ellas representa un tipo básico. Todos los ejemplos ya fueron presentados previamente en el capítulo 3. La primera configuración es la que tiene una zona globular y cuyo espectro presenta una banda de separación, también esta la configuración en la cual la distancia entre partículas cambia suavemente y que no presenta separación en el espectro. Se incluye la configuración con una distribución aleatoria, y una configuración bidimensional (grafeno) y por último dos configuraciones

tridimensionales tomadas de la cristalografía (Ribozima y Subtilisina).

Para cada configuración se prueba un grupo de cuatro condiciones iniciales, la primera corresponde a una perturbación de la posición y el momento (\mathbf{p}, \mathbf{q}) de las partículas sobre la frontera (primera y última), y monitorear como se distribuye la energía en el espacio de los modos en el tiempo. La segunda condición inicial corresponde a asignar la misma amplitud a todos los modos de vibración y ver si después de la integración se deposita preferentemente en algunos modos o regiones de modos. La tercera condición inicial consiste en asignar energía al 10% de los modos más bajos y monitorear durante y al final de la integración como fue la dinámica de transferencia de energía a modos más altos. Por último, se asigna energía al 10% de los modos más altos y se monitorea como es la distribución durante y al finalizar la integración.

La configuración del ejemplo 1, al ser homogénea, no presenta localización espacial (ver ejemplo 1 del capítulo 3). Pero en los ejemplos con zonas globulares, a nivel lineal, se observa localización lineal de los modos altos de la energía (ejemplo 2 del mismo capítulo). Uno de los aspectos más relevantes para esta sección es observar si se preserva la localización espacial observada para el caso lineal del capítulo 3 al incorporar la componente no lineal del modelo (2.83), los resultados de la localización espacial, no lineal, para diferentes ejemplos, se muestran en las animaciones de integración que acompañan este trabajo y se encuentran en el apéndice de animaciones,

Ejemplo 2. Integración numérica para una cadena de partículas unidimensional con una región de aglomeración.

Este ejemplo se estudia numéricamente debido a que es el que presenta de manera clara una localización de los modos altos de vibración en el espacio, también presenta una banda de separación entre modos altos \mathcal{I}_- y \mathcal{I}_+ . Es el paradigma en la aplicación de teoría de formas normales presentada en la sección 4.2 utilizando el argumento del espacio invariante determinado por los modos altos.

La cadena lineal de este ejemplo está compuesta por 109 partículas distribuidas a lo largo de una dimensión con una zona de aglomeración en la posición 0.40 sobre la cadena, se utilizaron las constantes $k_2, k_4, m = 1$. La integración se hizo para cuatro diferentes condiciones iniciales como se muestra en la Figura 5.7 y en la Figura 5.8 se muestra la evolución temporal de $|a_l|^2$, $l \in \mathcal{I}_+$ durante un tiempo $t = 100\tau_{\text{máx}}$. A continuación se hace la descripción de las diferentes condiciones iniciales y su correspondiente evolución.

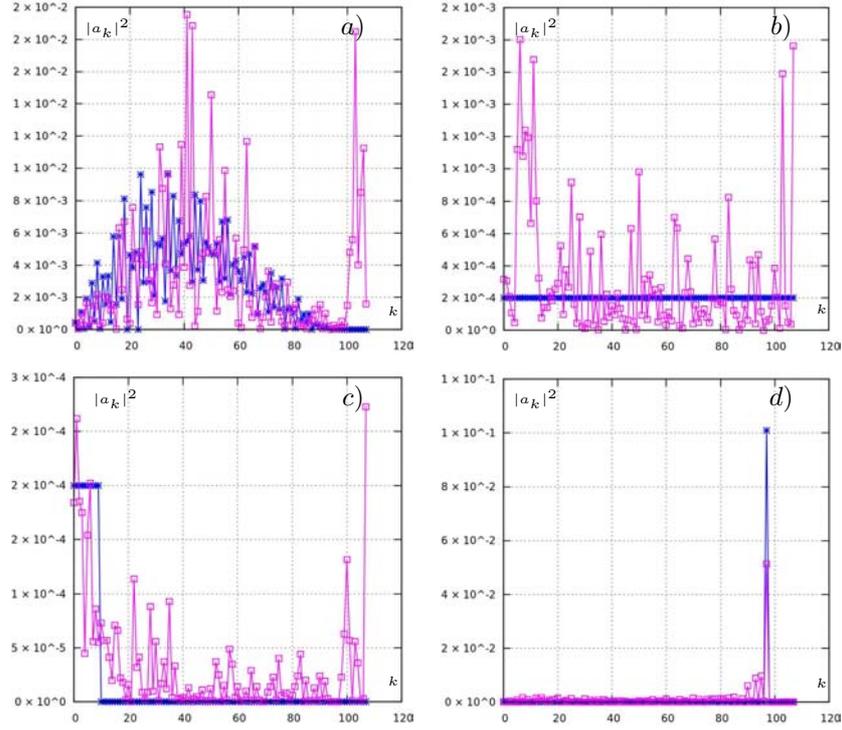


Figura 5.7: Condiciones iniciales (*) y finales (□) para el ejemplo 2, tiempo de integración $100\tau_{\text{máx}}$. a) Se perturban las partículas de los extremos. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente al 10 % de los modos de vibración mas bajos. d) Se utiliza la condición inicial determinada con el método del gradiente (descenso).

- a) Esta condición inicial indicada con el símbolo (*) corresponde a la definida al sacar del equilibrio la partícula de cada extremo de la cadena, esto se traduce a las variables de los modos a_k y lo que se muestra en la gráfica es $|a_k|^2$, se integra durante un tiempo igual $100\tau_{\text{máx}}$ para esta cadena y se gráfica el estado final (□), donde observa que la energía se mantiene aproximadamente en la misma región espectral. Sin embargo, algunos modos altos también obtienen energía con una amplitud comparable a la de las regiones medias.
- b) La condición inicial para el caso donde se excitan todos los modos con la misma intensidad (*), se observa que la distribución final de la energía (□) tiene preferencia por los extremos del espacio de modos, es decir, se deposita preferentemente en los modos bajos y en los modos altos.
- c) Se activan el primer 10 % de los modos (los que corresponden a las frecuencias bajas, en el estado final se observa que una parte de la energía ha permanecido en esta región, pero también se activaron los modos altos.
- d) Se utiliza como condición inicial el resultado obtenido con el método del gradiente (descenso), para la forma normal restringida al espacio invariante formado por los modos altos \mathcal{I}_+ , que para este caso $k \in \mathcal{I}_+ = \{108 \dots 120\}$. El estado final muestra que una parte de la energía ha logrado activar los modos mas bajos de esta cadena.

La evolución de $|A_{l,d}|^2$ se muestra en la Figura 5.8.

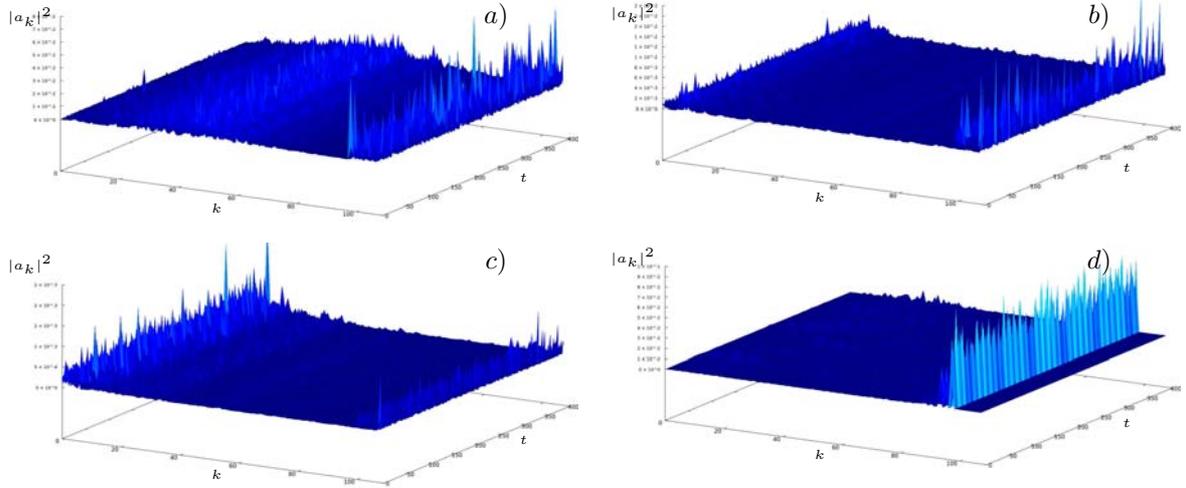


Figura 5.8: Evolución de $|A_{l,d}(t)|^2$ para el ejemplo 2, con un tiempo de integración $100\tau_{\text{máx}}$. Condiciones iniciales donde: a) Las partículas de los extremos se sacan del equilibrio. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente al 10% de los modos de vibración mas bajos. d) Se utiliza la condición inicial determinada con el método del gradiente (descenso) y se muestra la evolución para un tiempo $100\tau_{\text{máx}}$.

Ejemplo 5. Integración numérica para una cadena unidimensional de partículas con una distribución aleatoria

Esta configuración se mostró previamente en el ejemplo 5 de la sección 3.1. Se estudia en esta sección por que es representativa de cadenas con diferentes zonas de aglomeraciones, cada una de las aglomeraciones tiene diferente tamaño. La motivación para esta estudiar esta configuración, es tener como referencia un conjunto de diferentes aglomeración y monitorear la interacción de los modos de vibración para este tipo de cadenas y conocer algunos aspectos cualitativos de su evolución. Una de las características mas relevantes de esta cadena es la eliminación de cualquier posible simetría en la conformación de la misma, con el objetivo conocer como es la distribución y evolución de la energía en el espectro.

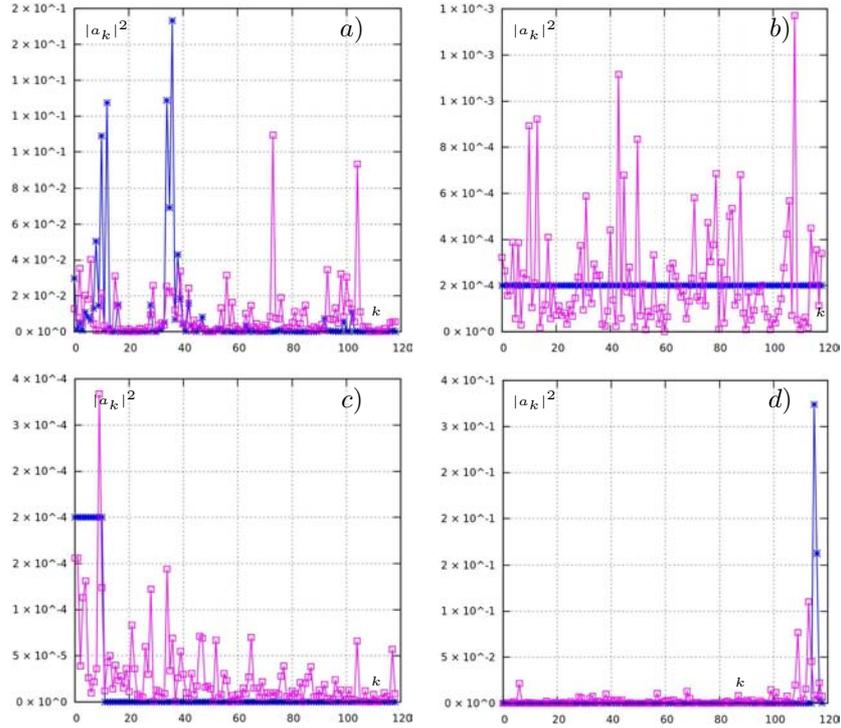


Figura 5.9: Condiciones iniciales (*) y finales (□) para el ejemplo 5, tiempo de integración entre $[0, 100\tau_{\text{máx}}]$. a) Se perturban las partículas de los extremos. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente al 10% de los modos de vibración mas bajos. d) Se utiliza la condición inicial encontrada con el método del gradiente (descenso).

En la gráfica 5.9 se presenta el estado inicial y final para diferentes condiciones iniciales.

- Esta configuración inicial (*), corresponde al haber perturbado de su posición de equilibrio las partículas de cada extremo de la cadena, se observa que esto activó principalmente dos regiones del espectro, la primera cercana a la parte baja del espectro y la siguiente en la zona media. Sin embargo, después de haber integrado esta condición un tiempo $100\tau_{\text{máx}}$ se muestran en la condición final (□) que la energía se ha trasladado a otras regiones del espectro.
- Esta condición inicial corresponde al haber asignado la misma cantidad de energía a todos los modos. La condición final, no muestra una preferencia aparente por alguna región particular del espacio de modos.
- La condición inicial en este caso corresponde al haber asignado energía únicamente al 10% de los modos mas bajos. El estado final es que hay una cierta persistencia de la energía en la misma región, pero también se han activado otros modos de vibración, en particular los modos mas altos.
- En este caso, se ha utilizado la condición inicial obtenida con el método del gradiente (descenso) para el subespacio formado por los modos altos. En la condición final se observa que se pierde la localización, es decir, la amplitud se ha distribuido sobre todos los modos.

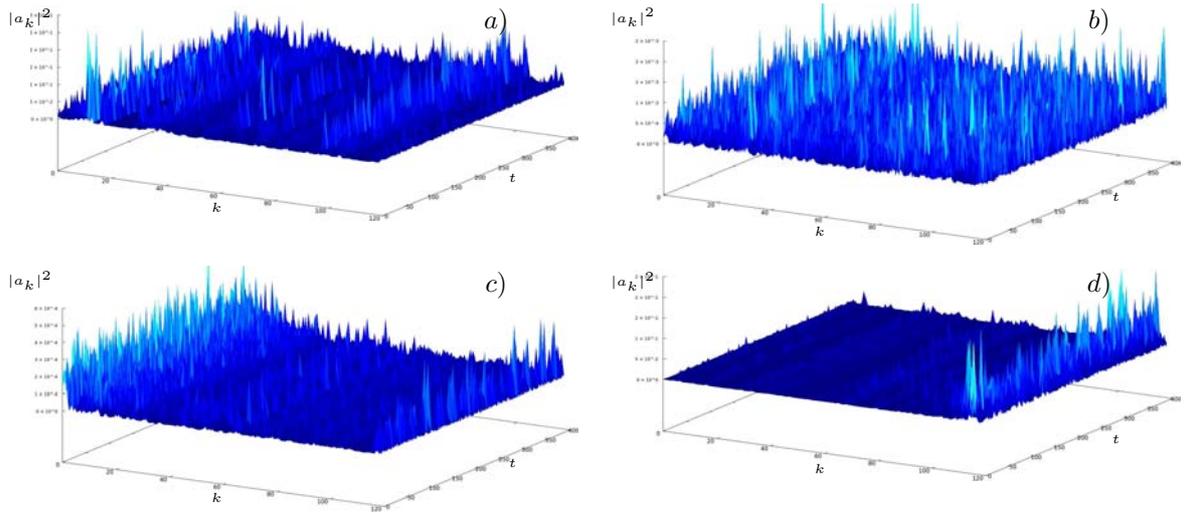


Figura 5.10: Evolución de $|A_{l,d}(t)|^2$ para el ejemplo 5 con un tiempo de integración $100\tau_{\text{máx}}$. Condiciones iniciales donde: a) Las partículas de los extremos se sacan del equilibrio. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente a los 10 modos de vibración mas bajos. d) Se utiliza la condición inicial obtenida con el método del gradiente (descenso).

La Figura 5.10 muestra la evolución de $|a_l|^2$, para diferentes condiciones iniciales, en todos los casos el tiempo de integración es $t = 100\tau_{\text{máx}}$.

Ejemplo 6. Integración numérica para una cadena unidimensional con una distribución que varia constantemente.

El siguiente caso de integración corresponde a una cadena unidimensional donde la distancia entre las partículas va cambiando suavemente, este caso fue presentado en el ejemplo 6 de la sección 3.1, tiene la característica de tener cambios suaves en la distribución de partículas alcanzando la densidad mas alta en el centro y la mas baja en los extremos. Del análisis espectral (capítulo 3) para la matriz de conectividad asociada a esta configuración en el caso lineal, se sabe que los modos de vibración mas altos se localizan en las regiones mas densas y los mas bajos lo hacen en los extremos que son las regiones de menor densidad. Lo que se muestra en este ejercicio es la forma en que evoluciona la energía en el espectro para diferentes distribuciones iniciales.

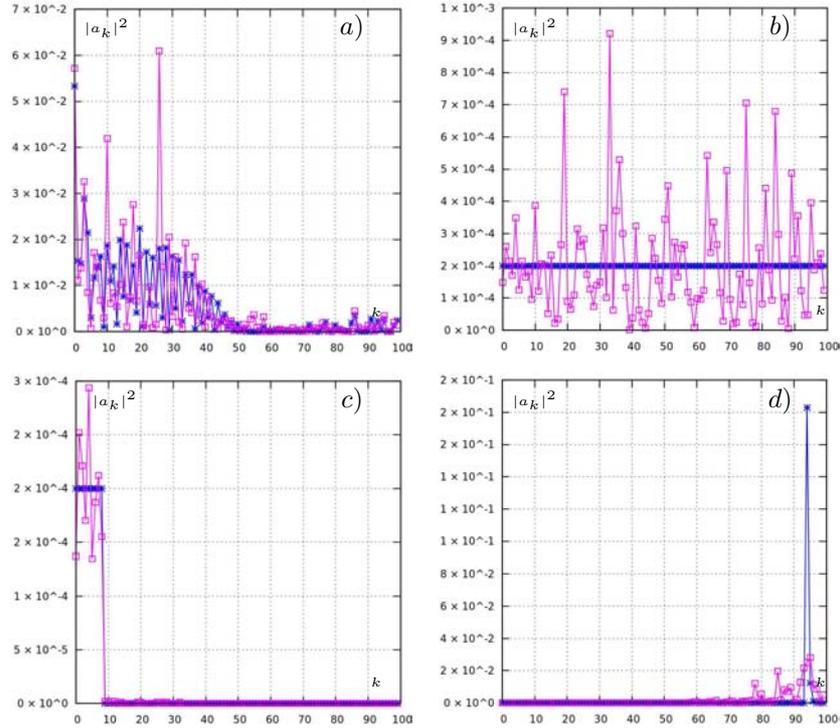


Figura 5.11: Condiciones iniciales (*) y finales (□) para el ejemplo 6, tiempo de integración $100\tau_{\text{máx}}$. a) Se perturban las partículas de los extremos. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente al 10% de los modos de vibración mas bajos. d) Se utiliza la condición inicial obtenida para este ejemplo con el método del gradiente (descenso).

Descripción de las gráficas de la Figura 5.11.

- La condición inicial (*) corresponde al haber sacado de su posición de equilibrio las partículas de cada extremo de la cadena, se observa como se activaron principalmente los modos bajos, después de la integración esta forma se mantiene con variaciones marginales, excepto por dos modos en la parte baja que han acumulado una cantidad de energía que duplica a la original.
- Para este caso se activaron todos los modos de vibración con la misma energía, después de integrar el sistema no se observa que la energía tenga una distribución preferencial sobre alguna región de modos.
- La condición inicial asigna energía al 10% de los modos mas bajos, se observa un comportamiento similar al mostrado por el ejemplo 1, la energía aunque oscila, no sale de la región inicial, este caso tiene una localización robusta para esta región de modos.
- En este caso la condición inicial corresponde con la obtenida con el método del gradiente (ascenso/descenso) para el espacio formado por los modos altos en la forma normal. Se observa que la condición final ha permanecido en la misma región, alcanzando algunos un poco mas bajos que los originalmente activos.

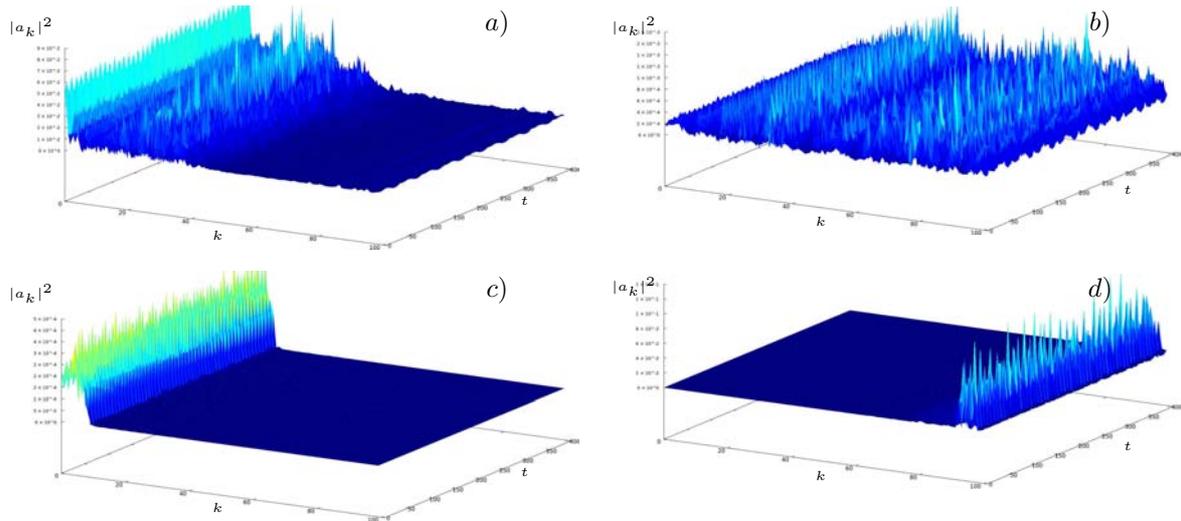


Figura 5.12: Evolución de $|A_{l,d}(t)|^2$ para ejemplo 6, tiempo de integración $100\tau_{\text{máx}}$. Condiciones iniciales donde: a) Las partículas de los extremos se sacan del equilibrio. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente al 10 % de los modos de vibración mas bajos. d) Se utiliza la distribución de energía determinada con el método del descenso.

Descripción de las gráficas de la Figura 6.

- La evolución de la condición inicial se mantiene en la misma región de modos, sin transferir energía de manera considerable a otras regiones del espacio de modos y aunque oscila en amplitud se mantienen en franjas bien definidas.
- Al activar todos los modos y monitorear la evolución se observa una pequeña región mas con menor actividad justo en la parte central, rodeada de dos franjas con mayor amplitud y de mayor actividad en el intercambio de energía.
- Para esta condición inicial, se puede ver como la energía se mantiene a lo largo de la integración en la misma zona, sin activar modos vecinos. Esta evolución recuerda la del ejemplo 1 que corresponde a la cadena FPU.
- Este caso también recuerda a la cadena FPU, la condición inicial es la obtenida con el método del gradiente, se observa que la localización es fenómeno robusto para este caso.

Esta configuración a pesar de ser inhomogénea, muestra un comportamiento parecido al de la cadena del ejemplo 1 (La cadena FPU clásica), De las observaciones, se puede decir, que los modos bajos en esta cadena no son sensibles a las zonas de mayor aglomeración, se comportan como si la cadena fuera homogénea, y algo análogo ocurre con los modos altos, se comportan como una FPU clásica, sin intercambiar energía con los bajos.

Ejemplo 7. Integración numérica para una red bidimensional formada por hexágonos (Grafeno)

La configuración para este caso es la del ejemplo 7 de la sección 3.1, que corresponde con la información cristalográfica del grafeno. La muestra esta constituida por 320 partículas (átomos) distribuidas uniformemente sobre un espacio rectangular con una altura de 16 átomos y una longitud de 20 átomos. La razón para trabajar con esta configuración es por que corresponde a un ejemplo de red atómica obtenida de observaciones cristalográficas, como se menciona anteriormente. Es una estructura bidimensional, pero compuesta de unidades hexagonales, donde cada partícula tiene contacto con tres partículas vecinas, excepto en las frontera, donde cada partícula tiene dos conexiones. Los resultados de este experimento se muestran en las figuras 5.13 y 5.14.

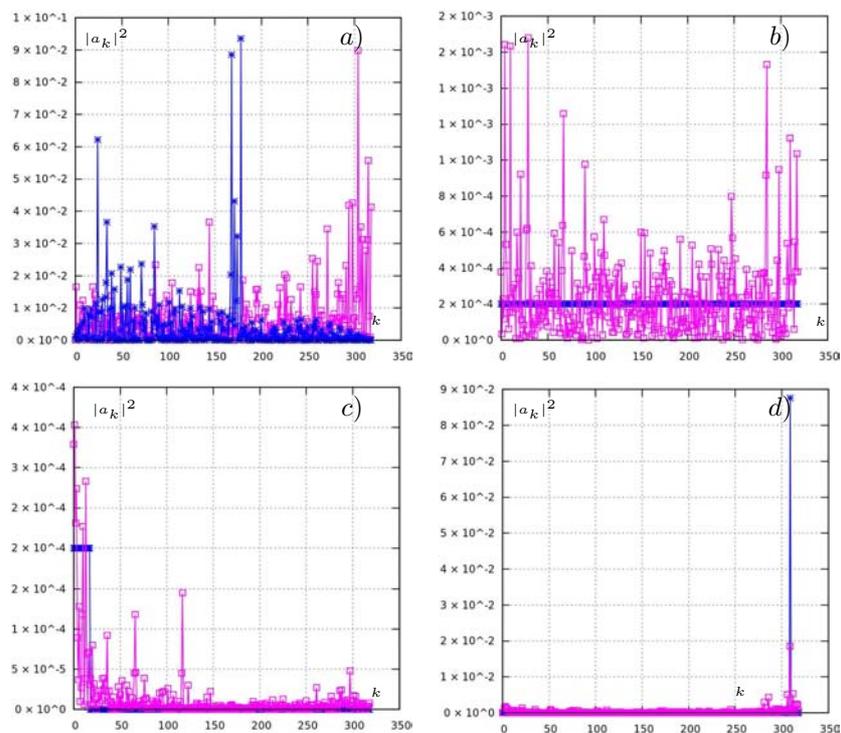


Figura 5.13: Condiciones iniciales (*) y finales (\square) para el ejemplo 7, tiempo de integración $100\tau_{\text{máx}}$. a) Se perturban las partículas de los extremos. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente al 10% de los modos de vibración mas bajos. d) se utiliza la distribución de energía determinada con el método del descenso.

Descripción de la figura 5.13.

- a) Para producir esta condición inicial (*), se sacaron del equilibrio dos partículas, cada una sobre la mitad de la frontera mas corta de la red bidimensional, lo cual tiene por objeto activar algunos modos de la región baja y media, al integrar el sistema una parte de la energía se deposita sobre los modos de la parte alta del espectro.
- b) Esta condición inicial corresponde con asignar la misma energía a todos los modos, después de integrar se observa que la energía se ha depositado preferentemente en las regiones baja y alta.

- c) La condición inicial corresponde con activar únicamente el 10% de los modos mas bajos, después de la integración se puede observar una persistencia de la energía en la misma región, aunque también han sido activados algunos modos cercanos, que no lo estaban en la condición inicial.
- d) Esta condición inicial fue obtenida con el método del gradiente (ascenso/descenso) para el subespacio formado por los modos altos, se puede apreciar que después de haber hecho la integración, una parte de la energía permanece en los modos altos, aunque también se han activado marginalmente algunos modos vecinos

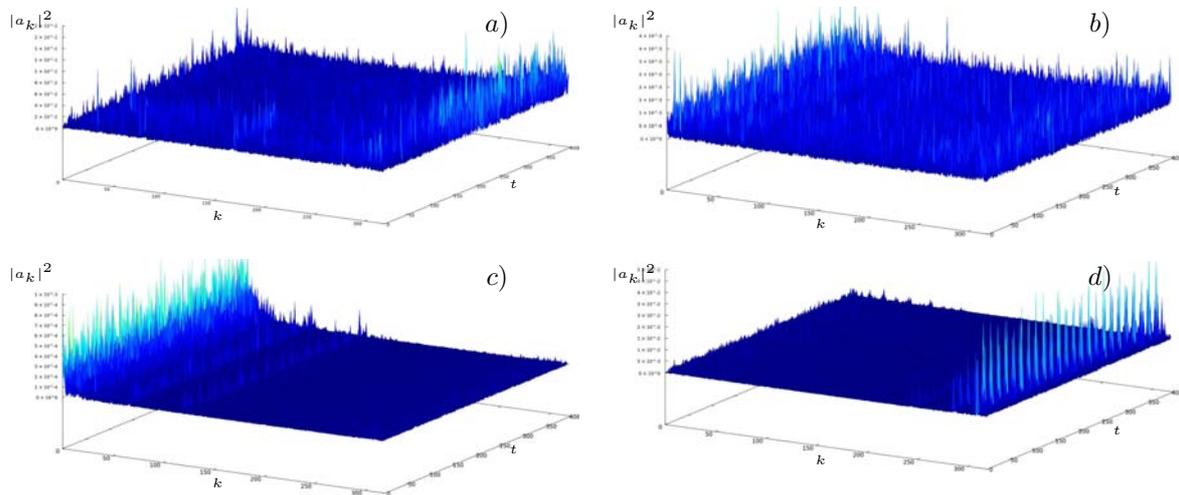


Figura 5.14: Evolución de $|A_{l,d}(t)|^2$ para ejemplo 7, tiempo de integración $100\tau_{\text{máx}}$. Condiciones iniciales donde: a) Las partículas de los extremos se sacan del equilibrio. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente al 10% de los modos de vibración mas bajos. d) Se utiliza la distribución de energía determinada con el método del gradiente (descenso).

Descripción de las graficas de la Figura 5.14 correspondiente a el ejemplo 7.

- a) Esta gráfica corresponde a la evolución con la condición inicial determinada por sacar dos partículas de su posición de equilibrio, lo que se observa es que los modos altos comienzan a acumular cada vez mas energía, lo que se interpreta como una localización.
- b) Se muestra la evolución de la condición inicial de haber activado todos los modos con la misma energía, se muestra una evolución donde la energía se va depositando en los modos mas bajos.
- c) Para esta condición inicial fue activado el 10% de los modos mas bajos de vibración, se puede apreciar como la energía persiste en la misma región, aunque se activan marginalmente dos bandas en la región de modos medios.
- d) La evolución que se muestra en esta gráfica corresponde con la condición inicial obtenida con el método del gradiente para esta configuración. Se puede apreciar una persistencia de la energía en la región de aglomeración original.

Este ejemplo muestra una distribución de la energía en el espacio de los modos parecida al del ejemplo unidimensional de la cadena donde las distancias entre partículas cambian constantemente, esto a pesar de ser un arreglo bidimensional. Se aprecia la existencia de dos regiones donde la energía se acumula, que son las formadas por los modos bajos y otra formada por los altos.

Ejemplo 8. Integración numérica para la Ribozima (PDB-300)

La configuración para este caso es la del ejemplo 8 de la sección 3.1 que corresponde con la información cristalográfica de la ribozima. Es una molécula que actúa como catalizador en diversos procesos enzimáticos. El archivo PDB que contiene la información cristalográfica indica $N = 879$ átomos, siendo los más abundantes el carbono, el nitrógeno y el fósforo. Aunque para este análisis se toman todas los átomos como si fueran partículas de un mismo elemento. Se presentan cuatro diferentes condiciones iniciales como se indica en la figura 5.15. En la figura 5.15 se muestra la evolución de la energía en el espacio de los modos de vibración. Es uno de los dos ejemplos de tridimensionales de este trabajo, para este caso, el número de partículas es $N = 879$.

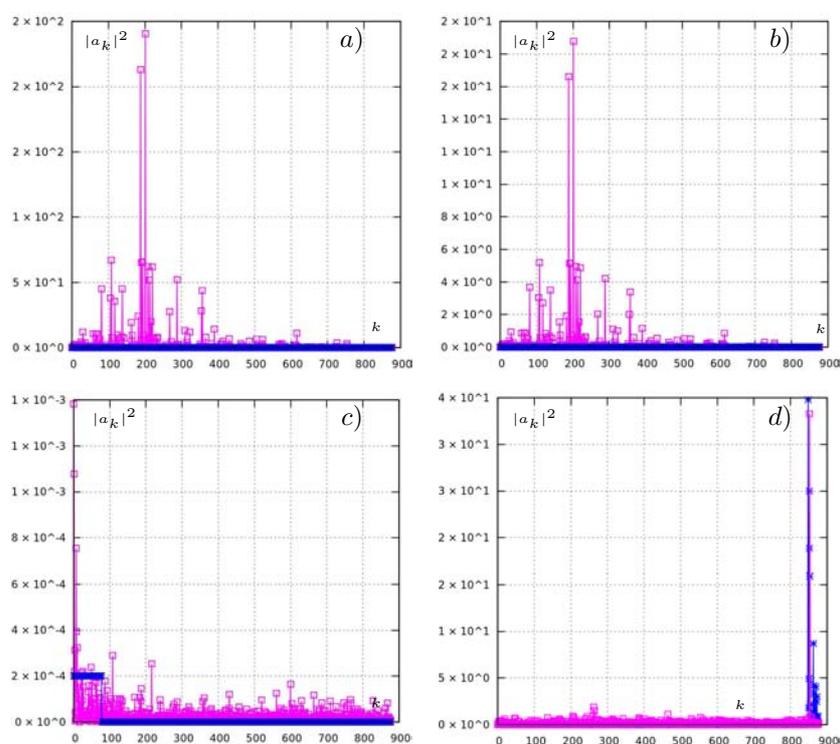


Figura 5.15: Condiciones iniciales (*) y finales (□) para el ejemplo 8, tiempo de integración $100\tau_{\text{máx}}$. a) Se asigna energía a las partículas con una distribución gaussiana. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente al 10% de los modos de vibración más bajos. d) Se utiliza la distribución de energía determinada con el método del descenso.

Descripción de la figura 5.15.

- a) Las condiciones iniciales, corresponden a una distribución gaussiana de energía en el espacio de los modos, la condición final muestra una clara localización de la energía en algunos modos centrales, la condición final que aquí se presenta se calculó con el método PEFRL, pero se hizo la misma integración con RK4 y muestra los mismos resultados.
- b) En este caso se asignó la misma energía a todos los modos de vibración, al igual que la grafica anterior, se puede ver como la energía se localiza en algunos modos centrales específicos, este cálculo se repitió con RK4 arrojando el mismo resultado.
- c) Esta condición inicial corresponde con haber activado el 10 % de los modos bajos, se puede apreciar en la condición final que una parte de la energía persiste en la misma región, aunque se han activado modos en casi todo el espacio.
- d) Esta condición inicial es la que se obtuvo con el método del gradiente, se puede apreciar una localización de la energía para los modos $l \in \mathcal{I}_+$ obtenidos para la forma normal.

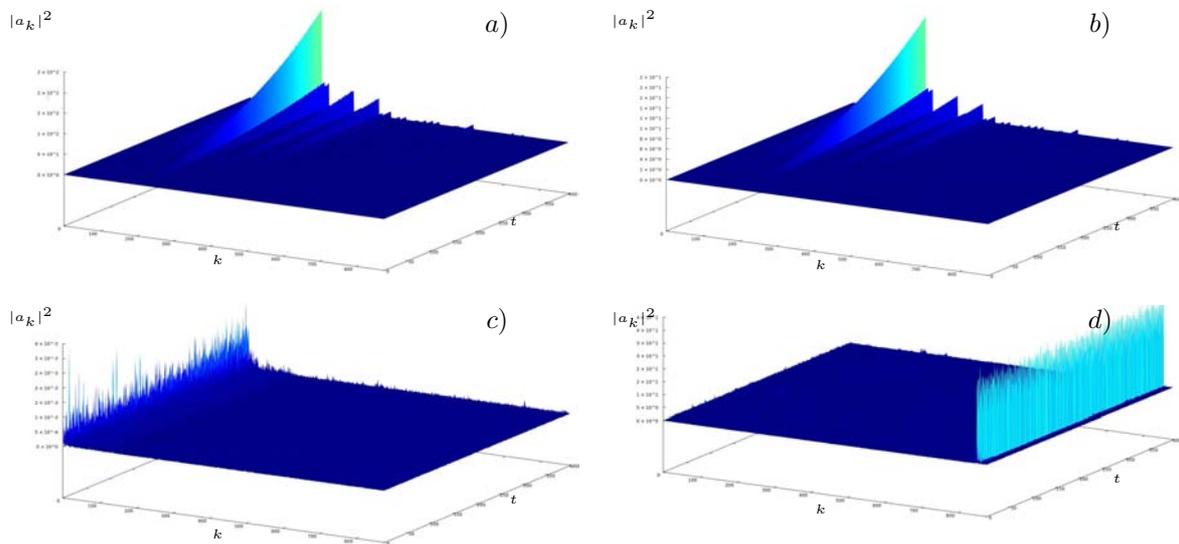


Figura 5.16: Evolución de $|A_{l,d}(t)|^2$ para ejemplo 8, tiempo de integración $100\tau_{\text{máx}}$: Condiciones iniciales donde: a) Evolución de la energía con una condición inicial dada por una distribución gaussiana en los modos. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente al 10% de los modos de vibración mas bajos. d) Se utiliza la distribución de energía determinada con el método del descenso.

Este ejemplo, muestra un fenómeno de localización en modos muy específicos y con cierta regularidad entre ellos. Se probaron diferentes pasos y los métodos PEFRL y RK4 y ambos coinciden en los resultados.

Ejemplo 9. Integración numérica para la Subtilisina (PDB-1AV7).

La configuración para este caso es la del ejemplo 9 de la sección 3.1, que corresponde con la información cristalográfica de la Subtilisina. La Subtilisina es una Peptidasa, es decir, rompe enlaces pépticos en proteínas, también se distingue por su estructura globular. El archivo PDB que contiene la información cristalográfica indica $N = 1939$ átomos. Al igual que el ejemplo anterior, los mas abundantes son, el carbono, el nitrógeno y el fósforo. Aunque para este análisis se toman todas los átomos como si fueran partículas de un mismo elemento.

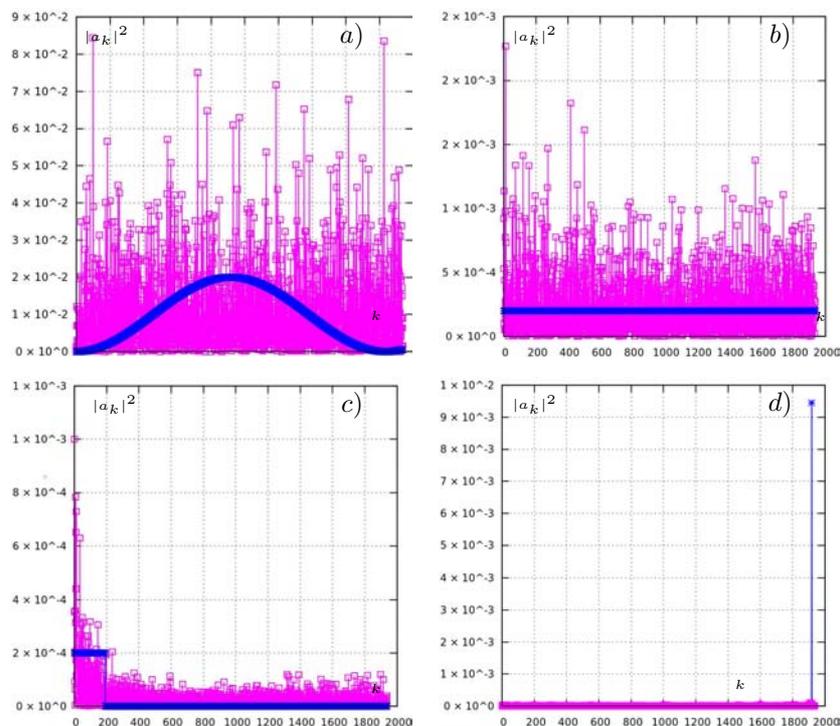


Figura 5.17: Condiciones iniciales (*) y finales (□) para el ejemplo 9, tiempo de integración $100\tau_{\text{máx}}$. a) Se asigna energía en los modos con una distribución gaussiana. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración, c) Se da energía únicamente a los 10 modos de vibración mas bajos. d) Se utiliza la condición inicial obtenida con el método del gradiente (descenso) para la forma normal.

Descripción de la gráficas de la Figura 5.17.

- Esta condición inicial corresponde a una distribución gaussiana de la energía sobre el espacio de modos. En la condición final la energía se ha distribuido en todas las regiones, sin mostrar preferencia de alguna en particular.
- Para este caso se utilizó la condición inicial correspondiente a la asignación de la misma cantidad de energía para todos los modos, se puede observar en la condición final que la energía mantiene una distribución de energía sobre todas las regiones, sin una preferencia aparente.

- c) Se asigna energía al 10% de los modos mas bajos, se puede ver que una parte importante de la energía permanece en la misma región, hay que recordar que el tiempo de integración en todos los casos ha sido de $100\tau_{\text{máx}}$.
- d) La condición inicial para este ejemplo corresponde con la determinada con el método del gradiente. La condición final muestra cierta localización en la misma región, aunque parte de la energía se ha trasladado a modos mas bajos.

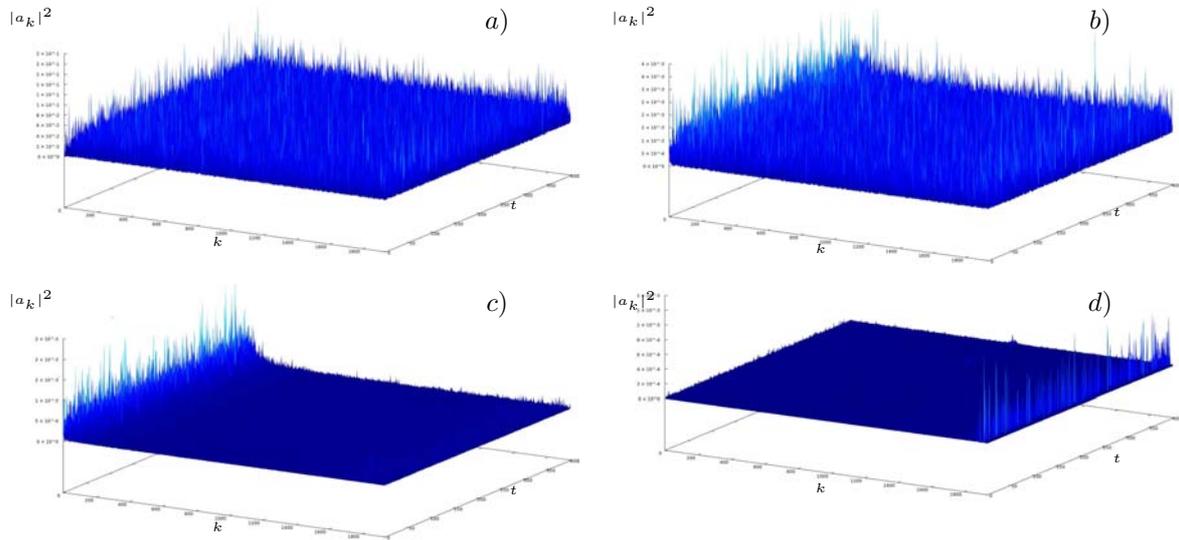


Figura 5.18: Condiciones iniciales para el ejemplo 9, tiempo de integración $100\tau_{\text{máx}}$. a) Evolución de la energía con una condición inicial dada por una distribución gaussiana en los modos. b) Se deposita la misma energía en todos los modos de vibración. c) Se da energía únicamente a los 80 modos de vibración mas bajos. d) Se utiliza la condición inicial obtenida con el método del gradiente (descenso) para la forma normal.

Las gráficas de la Figura 5.18 muestran la evolución de $|a_{l,d}|^2$, $l \in \mathcal{I}_+$, $d = 3$, para diferentes condiciones iniciales.

A diferencia del ejemplo tridimensional anterior, este ejemplo no muestra una preferencia de la energía para depositarse en ciertos modos específicos, sin embargo, si puede retener energía en los extremos del espacio de modos.

Capítulo 6

Conclusiones

Con un modelo tomado de la bioquímica basado en una interacción cuadrática mas una cuártica en la energía potencial se logró hacer una aproximación al modelo FPU cuártico, con la diferencia de que la interacción no esta restringida a primeros vecinos, sino que la interacción esta limitada por una esfera de radio crítico que posibilita interacciones entre partículas con vecinos más lejanos y/o en otras dimensiones, esto es a la aproximación de la dinámica molecular. La parte lineal del análisis de modos normales revela localización de los modos asociados a las altas frecuencias y numéricamente se observa que esta localización se preserva incluso al incorporar los términos no lineales en la fuerza.

Al utilizar la teoría de formas normales se logra encontrar un subespacio V_+ formado por los modos de vibración altos, donde existe una simetría ante cambios de fase global. Utilizando resultados topológicos se garantiza la existencia de un cierto número de órbitas periódicas, y este número coincide con el número de puntos críticos mínimo, acotado por $\dim(V)$. Encontrar estos puntos críticos en general puede requerir un mecanismo sofisticado, sin embargo, existen dos puntos críticos que se pueden obtener de manera directa, mediante el método del gradiente (descenso/ascenso más pronunciado), estos puntos son los que corresponden con la hipersuperficie de energía máxima y con la mínima. Se implementó el algoritmo del gradiente restringido a la hiperesfera $\mathcal{P} = C$ y se logró encontrar tanto el máximo como el mínimo para los diferentes ejemplos estructurales. Se analizó la estabilidad lineal de las soluciones oscilatorias obtenidas con este método en el espacio invariante y en todos los ejemplos se verifica que los valores propios para la matriz asociada a la ecuación de estabilidad son imaginarios puros.

La persistencia y estabilidad de las soluciones de la forma normal (4.43) aplicadas al sistema completo no se ha estudiado. Esto es equivalente a la persistencia bajo la adición de los términos de orden $O(6)$ de (4.32). Aunque no se observa gráficamente que las soluciones periódicas persistan, la localización espacial de los modos de alta frecuencia logra permanecer al menos un tiempo correspondiente a los tiempos de integración mostrados en la sección 3.1. Estos resultados se obtuvieron para arreglos tanto unidimensionales como tridimensionales como es el caso de las moléculas Ribozima y Subtilisina. Resulta de particular importancia estudios sobre estas estructuras, ya que pone de manifiesto que los modos de vibración se ubican en regiones espaciales específicas, dependiendo de la longitud de onda asociada, y esta localización no se destruye al incorporar los términos no lineales.

Mas que presentar un trabajo terminado, se muestran algunos resultados concretos, pero se dejan también algunas líneas de trabajo abiertas. Estas líneas fueron apareciendo a modo de ramificaciones a lo

largo del desarrollo de esta obra y en muchos casos se tomaron decisiones para privilegiar una línea sobre las demás, basados en criterios de tiempo y recursos, sin que eso signifique que son menos interesantes o virtualmente imposibles de abordar.

La primer pregunta natural posiblemente más que del capítulo 2 es de todo el trabajo, pero se coloca en dicho capítulo, es: ¿Por qué el modelo no incorpora términos cúbicos?. Si en principio estos son tan válidos como los cuárticos. En la referencia [9]. Se plantea un argumento físico que esta relacionado con la forma del potencial cerca de los puntos de equilibrio, lo que justifica su desaparición de un modo *heuristicamente*, pero no se tiene una respuesta contundente. Incluso se puede plantear hacer una extensión de este trabajo incorporando los términos cúbicos y buscar una forma normal para este caso y comparar con los resultados presentados aquí.

Una de las primeras observaciones en este capítulo es la aparición de bandas de separación en el espectro de la matriz de conectividad (2.26) y de modos localizados espacialmente para configuraciones de partículas con zonas de aglomeración. De los resultados de este capítulo, se sabe que las zonas de aglomeración se reflejan como bloques sobre la diagonal de la matriz de conectividad y que esto de alguna manera se traduce en las observaciones de bandas y de fenómenos de localización, sin embargo, cabe plantear la pregunta: ¿Como están relacionados los bloques con las observaciones espectrales? Una posible estrategia para abordar esta incógnita es partir de una configuración de cadena unidimensional sin aglomeraciones donde solo hay interacciones con primeros vecinos, después incorporar una inhomogeneidad a modo de perturbación y tratar de obtener algún resultado analítico para el espectro. Además esta pregunta abre la posibilidad de incorporar elementos de la teoría de grafos [84], [85].

Para los resultados de este capítulo se utilizaron tiempos de integración de 100 veces el periodo más largo $\tau_{\text{máx}}$ soportado por cada configuración, y esto se hizo así por cuestiones relacionadas al tiempo de computo. Sin embargo, cabe preguntar: ¿Qué pasa con la distribución de la energía para tiempos mucho mas largos? Por ejemplo un tiempo de integración de $10^5 \tau_{\text{máx}}$. Esto conduce a plantear mas preguntas, por ejemplo ¿Las estructuras tridimensionales (Ribozima/Subtilisina) integradas tiempos de $10^5 \tau_{\text{máx}}$ o más, exhiben los superciclos de recurrencia de energía para los modos, como lo hace una cadena FPU unidimensional homogénea de interacción con primeros vecinos? También se observa numéricamente que las órbitas periódicas no persisten mucho tiempo en el subespacio formado por los modos altos. Sin embargo, la localización de la energía en este subespacio muestra una persistencia mas robusta. la pregunta es: ¿Puede permanecer indefinidamente un porcentaje considerable de la energía en el subespacio formado por los modos altos? y ¿Hay recurrencias de energía, no para modos individuales, sino para regiones de modos?

Apéndice A

Apéndice

El cálculo que se muestra a continuación viene de la sección 4.5 y muestra la simplificación de tomar la ecuación (4.95) y hacer la separación de variables en su parte real e imaginaria;

$$A_{k,d} = Q_{k,d} + iP_{k,d}, \quad (\text{A.1})$$

$$w_{k,d} = q_{k,d} + ip_{k,d}, \quad (\text{A.2})$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} \dot{q}_{k,d} + i\dot{p}_{k,d} &= -i(\lambda - \omega_k)q_{k,d} + (\lambda - \omega_k)p_{k,d} \\ &+ i\frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} ((q_{k_1, d_1} + ip_{k_1, d_1})(Q_{k_2, d_1} + iP_{k_2, d_1})(Q_{k_4, d_2} - iP_{k_4, d_2}) \right. \\ &+ (Q_{k_1, d_1} + iP_{k_1, d_1})(q_{k_2, d_1} + ip_{k_2, d_1})(Q_{k_4, d_2} - iP_{k_4, d_2}) \\ &+ (Q_{k_1, d_1} + iP_{k_1, d_1})(Q_{k_2, d_1} + iP_{k_2, d_1})(q_{k_4, d_2} - iq_{k_4, d_2})) \\ &+ \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} ((q_{k_1, d_1} + ip_{k_1, d_1})(Q_{k_2, d_1} + iP_{k_2, d_2})(Q_{k_3, d_2} - iP_{k_3, d_2})) \\ &+ (Q_{k_1, d_1} + iP_{k_1, d_1})(q_{k_2, d_1} + ip_{k_2, d_1})(Q_{k_3, d_2} - iP_{k_3, d_2}) \\ &+ (Q_{k_1, d_1} + iP_{k_1, d_1})(Q_{k_2, d_1} + iP_{k_2, d_1})(q_{k_3, d_2} - ip_{k_3, d_2})) \left. \right] \\ &+ O((q_{k,d} + ip_{k,d})^2), \quad \forall k \in \mathcal{I}_+, \quad d = 1, \dots, D, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

separando en parte real e imaginaria

$$\begin{aligned}
\dot{q}_{k,d} + i\dot{p}_{k,d} &= (\lambda - \omega_k)p_{k,d} \\
&+ \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2} - q_{k_1, d_1} Q_{k_4, d_2} P_{k_2, d_1} \right. \\
&- Q_{k_2, d_1} Q_{k_4, d_2} p_{k_1, d_1} - p_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2} \\
&+ Q_{k_1, d_1} q_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2} - Q_{k_1, d_1} Q_{k_4, d_2} p_{k_2, d_1} - q_{k_2, d_1} Q_{k_4, d_2} P_{k_1, d_1} - P_{k_1, d_1} p_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2} \\
&+ Q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} p_{k_4, d_2} - Q_{k_1, d_1} q_{k_4, d_2} P_{k_2, d_1} - Q_{k_2, d_1} q_{k_4, d_2} P_{k_1, d_1} - P_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} p_{k_4, d_2}) \\
&+ \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} P_{k_3, d_2} - q_{k_1, d_1} Q_{k_3, d_2} P_{k_2, d_1} - Q_{k_2, d_1} Q_{k_3, d_2} p_{k_1, d_1} - p_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} P_{k_3, d_2} \\
&+ Q_{k_1, d_1} q_{k_2, d_1} P_{k_3, d_2} - Q_{k_1, d_1} Q_{k_3, d_2} p_{k_2, d_1} - q_{k_2, d_1} Q_{k_3, d_2} P_{k_1, d_1} - P_{k_1, d_1} p_{k_2, d_1} P_{k_3, d_2} \\
&+ Q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} p_{k_3, d_2} - Q_{k_1, d_1} q_{k_3, d_2} P_{k_2, d_1} - Q_{k_2, d_1} q_{k_3, d_2} P_{k_1, d_1} - P_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} p_{k_3, d_2}) \left. \right] \\
&+ i \left\{ -(\lambda - \omega_k)q_{k,d} \right. \\
&+ \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} Q_{k_4, d_2} + q_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2} \right. \\
&+ Q_{k_2, d_1} p_{k_1, d_1} P_{k_4, d_2} - Q_{k_4, d_2} p_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} \\
&+ Q_{k_1, d_1} q_{k_2, d_1} Q_{k_4, d_2} + Q_{k_1, d_1} p_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2} + q_{k_2, d_1} P_{k_1, d_1} P_{k_4, d_2} - Q_{k_4, d_2} P_{k_1, d_1} p_{k_2, d_1} \\
&+ Q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} q_{k_4, d_2} + Q_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} p_{k_4, d_2} - Q_{k_2, d_1} P_{k_1, d_1} p_{k_4, d_2} - q_{k_4, d_2} P_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1}) \\
&+ \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} Q_{k_3, d_2} + q_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} P_{k_3, d_2} + Q_{k_2, d_1} p_{k_1, d_1} P_{k_3, d_2} - Q_{k_3, d_2} p_{k_1, d_1} P_{k_2, d_2} \\
&+ Q_{k_1, d_1} q_{k_2, d_1} Q_{k_3, d_2} + Q_{k_1, d_1} p_{k_2, d_1} P_{k_3, d_2} + q_{k_2, d_1} P_{k_1, d_1} P_{k_3, d_2} - Q_{k_3, d_2} P_{k_1, d_1} p_{k_2, d_1} \\
&+ Q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} q_{k_3, d_2} + Q_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} p_{k_3, d_2} + Q_{k_2, d_1} P_{k_1, d_1} p_{k_3, d_2} - q_{k_3, d_2} P_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1}) \left. \right] \left. \right\}, \tag{A.4}
\end{aligned}$$

desarrollando las sumas que operan sobre las variables q_{k_i, d_j} y p_{k_i, d_j} , $i = 1, 2, 3, 4$, $j = 1, 2$ y agrupando términos, las ecuaciones (A.3) y (A.4) se expresan a continuación

$$\begin{aligned}
\dot{q}_{k,d} = & \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2} - Q_{k_4, d_2} P_{k_2, d_1}) q_{k_1, d_1} \right. \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_1, d_1} P_{k_4, d_2} - Q_{k_4, d_2} P_{k_1, d_1}) q_{k_2, d_1} \\
& - \sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} + Q_{k_2, d_1} P_{k_1, d_1}) q_{k_4, d_2} \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_2, d_1} P_{k_3, d_2} - Q_{k_3, d_2} P_{k_2, d_1}) q_{k_1, d_1} \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_1, d_1} P_{k_3, d_2} - Q_{k_3, d_2} P_{k_1, d_1}) q_{k_2, d_1} \\
& \left. - \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} + Q_{k_2, d_1} P_{k_1, d_1}) q_{k_3, d_2} \right] \\
& + (\lambda - \omega_k) p_{k,d} + \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{d_1, d_2}^D \left[- \sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_2, d_1} Q_{k_4, d_2} + P_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2}) p_{k_1, d_1} \right. \\
& - \sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_1, d_1} Q_{k_4, d_2} + P_{k_1, d_1} P_{k_4, d_2}) p_{k_2, d_1} \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} - P_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1}) p_{k_4, d_2} \\
& - \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_2} Q_{k_3} + P_{k_2} P_{k_3}) p_{k_1} \\
& - \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_1, d_1} Q_{k_3, d_2} + P_{k_1, d_1} P_{k_3, d_2}) p_{k_2, d_1} \\
& \left. + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} - P_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1}) p_{k_3, d_2}, \right. \tag{A.5}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{p}_{k,d} = & -(\lambda - \omega_k)q_{k,d} + \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_2, d_1} Q_{k_4, d_2} + P_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2}) q_{k_1, d_1} \right. \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_1, d_1} Q_{k_4, d_2} + P_{k_1, d_1} P_{k_4, d_2}) q_{k_2, d_1} \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} - P_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1}) q_{k_4, d_2} \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_2, d_1} Q_{k_3, d_2} + P_{k_2, d_1} P_{k_3, d_2}) q_{k_1, d_1} \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_1, d_1} Q_{k_3, d_2} - P_{k_1, d_1} P_{k_3, d_2}) q_{k_2, d_1} \\
& \left. + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_2} - P_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1}) q_{k_3, d_2} \right] \\
& + \frac{3k_4}{2} \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{k_1 \in \mathcal{I}_+} \sum_{k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2} - Q_{k_4, d_2} P_{k_2, d_1}) p_{k_1, d_1} \right. \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_1, d_1} P_{k_4, d_2} - Q_{k_4, d_2} P_{k_1, d_1}) p_{k_2, d_1} \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k k_4} (Q_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} + Q_{k_2, d_1} P_{k_1, d_1}) p_{k_4, d_2} \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_2, d_1} P_{k_3, d_2} - Q_{k_3, d_2} P_{k_2, d_1}) p_{k_1, d_1} \\
& + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_1, d_1} P_{k_3, d_2} - Q_{k_3, d_2} P_{k_1, d_1}) p_{k_2, d_1} \\
& \left. + \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1 k_2 k_3 k} (Q_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} + Q_{k_2, d_1} P_{k_1, d_1}) p_{k_3, d_2}, \right. \tag{A.6}
\end{aligned}$$

recordando la simetría de los factores $\Gamma_{k_1 k_2 k_3 k_4}$ respecto a la permutación de índices y utilizando el hecho de que los índices de las variables q_{k_i, d_j} y p_{k_i, d_j} con $k_i \in \mathcal{I}_+$, $i = 1, 2, 3, 4$ y $j = 1, 2$, siempre corren sobre todos los elementos de \mathcal{I}_+ sin depender de i , entonces las ecuaciones (A.5) y (A.6) se simplifican como se indica a continuación

$$\begin{aligned}
\dot{q}_{k,d} = & 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{l \in \mathcal{I}_+} \left\{ \sum_{k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{lk_2kk_4} (Q_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2} - Q_{k_4, d_2} P_{k_2, d_1}) \right. \right. \\
& + \sum_{k_1, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1lk_4} (Q_{k_1, d_1} P_{k_4, d_2} - Q_{k_4, d_2} P_{k_1, d_1}) \\
& \left. \left. - \sum_{k_1, k_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1k_2kl} (Q_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1} + Q_{k_2, d_1} P_{k_1, d_1}) \right\} q_{l,d} \right] \\
& + (\lambda - \omega_k) p_k + 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{l \in \mathcal{I}_+} \left\{ - \sum_{k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{lk_2kk_4} (Q_{k_2} Q_{k_4} + P_{k_2} P_{k_4}) \right. \right. \\
& - \sum_{k_1, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1lk_4} (Q_{k_1} Q_{k_4} + P_{k_1} P_{k_4}) \\
& \left. \left. + \sum_{k_1, k_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1k_2kl} (Q_{k_1} Q_{k_2} - P_{k_1} P_{k_2}) \right\} p_{l,d} \right], \tag{A.7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{p}_{k,d} = & -(\lambda - \omega_k) q_{k,d} + 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{l \in \mathcal{I}_+} \left\{ \sum_{k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{lk_2kk_4} (Q_{k_2, d_1} Q_{k_4, d_2} + P_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2}) \right. \right. \\
& + \sum_{k_1, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1lk_4} (Q_{k_1, d_1} Q_{k_4, d_2} + P_{k_1, d_1} P_{k_4, d_2}) \\
& \left. \left. + \sum_{k_1, k_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1k_2kl} (Q_{k_1, d_1} Q_{k_2, d_1} - P_{k_1, d_1} P_{k_2, d_1}) \right\} q_{l,d} \right] \\
& + 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \left[\sum_{l \in \mathcal{I}_+} \left\{ \sum_{k_2, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{lk_2kk_4} (Q_{k_2, d_1} P_{k_4, d_2} - Q_{k_4, d_2} P_{k_2, d_1}) \right. \right. \\
& + \sum_{k_1, k_4 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1lk_4} (Q_{k_1, d_1} P_{k_4, d_2} - Q_{k_4, d_2} P_{k_1, d_1}) \\
& \left. \left. + \sum_{k_1, k_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{k_1k_2kl} (Q_{k_1, d_1} P_{k_2, d_2} + Q_{k_2, d_1} P_{k_1, d_1}) \right\} p_{l,d} \right]. \tag{A.8}
\end{aligned}$$

Simplificando las expresiones anteriores utilizando nuevamente la simetría de los coeficientes $\tilde{\Gamma}_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ ante permutaciones de índices l_i y utilizando el hecho de que los índices sobre las sumas son mudos y pueden ser cambiados por dos índices genéricos s_{1, d_j} y s_{2, d_j} , $j = 1, 2$, ambos contenidos en \mathcal{I}_+ . De tal forma que las nuevas expresiones quedan como:

$$\begin{aligned}
\dot{q}_{k,d} = & 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l \in \mathcal{I}_+} \sum_{s_1, s_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{kls_1s_2} (Q_{s_1, d_1} P_{s_2, d_2} - 3Q_{s_2, d_2} P_{s_1, d_1}) q_{l,d} + (\lambda - \omega_k) p_{k,d} \\
& - 3k_4 \sum_{l \in \mathcal{I}_+} \sum_{s_1, s_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{kls_1s_2} (Q_{s_1, d_1} Q_{s_2, d_2} + 3P_{s_1, d_1} P_{s_2, d_2}) p_{l,d}, \tag{A.9}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{p}_{k,d} = & -(\lambda - \omega_k)q_{k,d} + 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{l \in \mathcal{I}_+} \sum_{s_1, s_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{kls_1s_2} (3Q_{s_1, d_1} Q_{s_2, d_2} + P_{s_1, d_1} P_{s_2, d_2}) q_{l,d} \\
& + 3k_4 \sum_{l \in \mathcal{I}_+} \sum_{s_1, s_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{kls_1s_2} (3Q_{s_2, d_2} P_{s_1, d_1} - Q_{s_1, d_1} P_{s_2, d_2}) p_{l,d}.
\end{aligned} \tag{A.10}$$

Como Q_{s_i}, d_j y P_{s_i, d_j} , ($i = 1, 2, 3, 4, j = 1, 2$) son constantes respecto al tiempo, entonces las ecuaciones (A.9) y (A.10), se pueden expresar de la forma:

$$\begin{pmatrix} \dot{q}_k \\ \dot{p}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{B} & \mathcal{C} \\ -\mathcal{A} & -\mathcal{B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_k \\ p_k \end{pmatrix}, \tag{A.11}$$

o equivalentemente

$$\begin{pmatrix} \dot{q}_k \\ \dot{p}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & \mathbb{O} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{B} & \mathcal{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_k \\ p_k \end{pmatrix}, \tag{A.12}$$

donde $\mathbb{O}, \mathbb{I}, \mathcal{A}, \mathcal{B}$ y \mathcal{C} son matrices de tamaño $n_1 \times n_1$ con $n_1 = \dim\{\mathcal{I}_+\}$ y los elementos de las matrices están determinados como

$$\mathcal{A}_{kl} = (\lambda - \omega_k)\delta_{kl} - 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{s_1, s_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{kls_1s_2} (3Q_{s_1, d_1} Q_{s_2, d_2} + P_{s_1, d_1} P_{s_2, d_2}), \tag{A.13}$$

$$\mathcal{B}_{kl} = 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{s_1, s_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{kls_1s_2} (3Q_{s_2, d_2} P_{s_1, d_1} - Q_{s_1, d_1} P_{s_2, d_2}), \tag{A.14}$$

$$\mathcal{C}_{kl} = -(\lambda - \omega_k)\delta_{kl} - 3k_4 \sum_{d_1, d_2=1}^D \sum_{s_1, s_2 \in \mathcal{I}_+} \tilde{\Gamma}_{kls_1s_2} (Q_{s_1, d_1} Q_{s_2, d_2} + 3P_{s_1, d_1} P_{s_2, d_2}). \tag{A.15}$$

Con lo que finaliza la simplificación de la separación en parte real y compleja para la ecuación variacional 4.95 de la sección 4.5.

Bibliografía

- [1] M. Levitt. Molecular dynamics of native protein i. computer simulation of trajectories. *Molecular Biology*, 168:595–620, 1983.
- [2] P. Stern M. Levitt, C. Sander. Protein normal-mode dynamics: Trypsin inhibitor, crambin, ribonuclease and lysozyme. *Molecular Biology*, 181:423–447, 1985.
- [3] M. Karplus B. Brooks. Harmonic dynamics of proteins: Normal modes and fluctuations in bovine pancreatic trypsin inhibitor. *Biophysics*, 80:6571–6575, 1983.
- [4] A. Maritan E Domany C. Clementi, M. Vendruscolo. Folding lennard-jones proteins by a contact potential. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, 37:534–543, 1999.
- [5] D. ben-Avraham M. Tirion. Normal mode analysis of g-actin. *Molecular Biology*, 230:186–195, 1995.
- [6] M. Tirion D. ben Avraham. Dynamic and elastic properties of f-actin: A normal-modes analysis. *Biological Physics*, 68:1231–1245, 1995.
- [7] M. Tirion D. ben Avraham. Normal modes analyses of macromoleculless. *Physica A*, 249:415–423, 1998.
- [8] Y.-H Sanejouand S. Nicolay. Functional modes of proteins are among the most robust. *Physical Review Letters*, 96:078104, 2006.
- [9] F. Piazza P. De Los Rios B. Juanico, Y.-H. Sanejouand. Discrete breathers in nonlinear network models of proteins. *Physical Review Letters*, 99:238104, 2007.
- [10] Y. Sanejouand F. Piazza. Breather-mediated energy transfer in proteins. *Discrete and Continuous Dynamical Systems S*, 4:1247–1266, 2011.
- [11] Y.-H. Sanejouand F. Piazza. Discrete breathers in protein structures. *Physical Biology*, 5:026001, 2008.
- [12] Y.-H. Sanejouand F. Piazza. Long-range energy transfer in proteins. *Physical Biology*, 6:046014, 2009.
- [13] R. C. Hynes V. S. Stoll, B. T. Eger. Differences in binding modes of enantiomers of 1-acetamido boronic acid based protease inhibitors: Crystal structures of γ -chymotrypsin and subtilisin carlsberg complexes. *Biochemistry*, 37:451–462, 1998.
- [14] R. L. Ornstein Y. Zheng. Molecular dynamics of subtilisin carlsberg in aqueous and nonaqueous solutions. *Biopolymers*, 38:791–799, 1996.

- [15] A. Weinstein. Normal modes for non-linear hamiltonian systems. *Inventiones mathematicae*, 20:377–410, 1973.
- [16] J. Moser. Periodic orbits near an equilibrium and a theorem by alan weinstein. *Pure and Applied Mathematics*, 29:127–147, 1976.
- [17] E. Zehnder H. Hofer. *Symplectic invariants and Hamiltonian dynamics*. Biräkhuser Basel, Zürich, 1994.
- [18] G. Hall K. Meyer. *Introduction to Hamiltonian Dynamical Systems and the N-Body Problem*. Springer, New York, 2008.
- [19] D. Vella D. Bambusi. Quasi periodic breathers in hamiltonian lattices with symmetries. *Discrete and Continuous Dynamical Systems S*, 2:389–399, 2002.
- [20] N.N. Nekhoroshev. The poincaré-lyapunov-liouville-arnold theorem, translation in funct. *Anal of applied*, 28:128–129, 1994.
- [21] P. Panayotaros R. de la Llave. Gravity waves on the surface of the sphere. *Nonlinear Science*, 6:147–167, 1996.
- [22] P. Panayotaros. Near-monochromatic water waves on the sphere. *Physica D*, 130:273–290, 1999.
- [23] A. C. Scott J. C. Eilbeck, P. S. Lomdahl. The discrete self-trapping equation. *Physica D*, 16:318–338, 1985.
- [24] S. Aubry R.S. MacKay. Proof of existence of breathers for time-reversible or hamiltonian networks of weakly coupled oscillators. *Nonlinearity*, 7:1623–1643, 1994.
- [25] E.J. Doedel C.L. Pando. Bifurcation structures and dominant modes near relative equilibria in the one dimensional discrete nonlinear schrödinger equation. *Physica D*, 238:687–698, 2009.
- [26] A. Aceves P. Panayotaros. Stabilization of coherent breathers in perturbed hamiltonian coupled oscillators. *Physical Review Letters*, 45:3964–3972, 2011.
- [27] G. Benettin F. Fassò. Composition of lie transforms with rigorous estimates and applications to hamiltonian perturbation theory. *Applied Mathematics and Physics*, 140:307–329, 1989.
- [28] E.J. Doedel. *Lecture notes on numerical analysis of nonlinear equations*. <http://cmvl.cs.concordia.ca/auto/notes.pdf>, Montreal, 2010.
- [29] E. Valdinoci. *Tori di transizione nella teoria KAM*. PhD thesis, University of Roma, 1998. Tesis Laurea.
- [30] D. Bambusi. Nekhoroshev estimates for small amplitude solutions in nonlinear schrödinger equations. *Mathematische Zeitschrift*, 230:345–387, 1999.
- [31] A. Ponno S. Flach. The fermi-pasta-ulam problem, periodic orbits, normal forms and resonance overlap criteria. *Physica D*, 237:908–917, 2008.
- [32] T. Kappeler A. Henrici. Resonant normal form for even periodic fpu chains. *European Mathematical Society*, 11:1025–1056, 2009.

- [33] S. Ulam E. Fermi, J. Pasta. Studies of non linear problems. *Los Alamos Scientific Laboratory*, 66:491–502, 1955.
- [34] B. Chirikov F. Israilev. Statistical properties of a non linear string. *Soviet Physics Doklady*, 11:30–32, 1966.
- [35] M. Kruskal R. Miura C. Gardner, J. Green. Method for solving the korteweg-devries equation. *Physical Review Letters*, 19:1095–1097, 1967.
- [36] M. Kruskal N. Zabusky. Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of the initial states. *Physical Review letters*, 15:240–243, 1965.
- [37] A. Ponno D. Bambusi. On metastability in fpu. *Communications in Mathematical Physics*, 264:539–561, 2006.
- [38] C. Skokos C. Antonopoulos, T. Bountis. Chaotic dynamics of n-degree of freedom hamiltonian systems. *Bifurcation and Chaos*, 16:1777–1793, 2006.
- [39] Y. Peter. *Leapfrog method and other “symplectic” algorithms for integrating Newton’s laws of motion*. University of California, Department of Physics, San Diego, 2011.
- [40] P. Panayotaros F. Martínez-Farías. Breather solutions for a model type fpu using birkhoff normal forms. *Physica D (preprint)*, 2016.
- [41] Rolf Berndt. *An Introduction to Symplectic Geometry*. AMS, Rhode Island, 2001.
- [42] J. Nohel F. Brauer. *The qualitative theory of ordinary differential equations*. Dover, New York, 1989.
- [43] J. Davies M. Galassi. *GNU Scientific library reference manual*. The GSL Team.
- [44] W. T. Vetterling B. P. Flannery, S. A. Teukolsky. *Numerical recipes in C*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [45] B. Eckel. *Thinking In C++*. Prentice Hall, New Jersey, 2000.
- [46] R. B. Samuel. *3-D Computer graphics*. Cambridge University Press, New York, 2003.
- [47] D. Wolff. *OpenGL 4.0 Shading Language Cookbook*. Packt Publishing, Birmingham, 2011.
- [48] V. G. Servo G. L. Kotkin. *Classical Mechanics Problems*. Mir, Moscu, 1988.
- [49] S. Mikhailov. *Physics & applications of graphene-Theory*. InTech, Rijeka, 2011.
- [50] E. Stumpp H. P. Boehm, R. Setton. Nomenclature and terminology of graphite intercalation compounds. *Pure and Applied Chemistry*, 66:1893–1901, 1994.
- [51] N. Goldsman A. Akturk. Electron transport and full-band electron-phonon interactions in graphene. *Applied Physics*, 103:053702, 2008.
- [52] S. Mikhailov. *Physics & applications of graphene-Experiments*. InTech, Rijeka, 2011.
- [53] C. Lee. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*, 321:385–388, 2008.

- [54] A. L. Ivanovskii A. N. Enyashin. Graphene-like bn allotropes: Structural and electronic properties from dftb calculations. *Chemical Physics Letters*, 509:143–147, 2011.
- [55] Theoretical and Computational biophysics group. Graphene-like bn allotropes: Structural and electronic properties from dftb calculations. Technical report, NIH Center for Macromolecular Modeling & Bioinformatics University of Illinois.
- [56] J. Jiang J. L. Sussman, D. Lin. Protein data bank (pdb): Database of three-dimensional structural information of biological macromolecules. *Acta Crystallographica Section D*, 54:1078–1084, 1998.
- [57] B. James W. G. Scott. Capturing the structure of a catalytic rna intermediate: The hammerhead ribozyme. *Science*, 274:2065–2069, 1996.
- [58] Y.-H. Sanejouand F. Tama. Conformational change of proteins arising from normal mode calculations. *Protein Engineering*, 14:1–6, 2001.
- [59] J. D. Faires R. Burden. *Numerical Analysis*. Thompson Learning, México, 2002.
- [60] J. M. Burke K. I. Tasiouka. A modified group i intron can function as both a ribozyme and a 5' exon in a trans-exon ligation reaction. *Gene*, 144:1119, 1994.
- [61] A. Kidera H. Ishida, Y. Jochi. Dynamic structure of subtilisin-eglin c complex studied by normal mode analysis. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, 32:324–333, 1998.
- [62] H. Ito. Integrability of hamiltonian systems and birkhoff normal forms in the simple resonance case. *Mathematische Annalen*, 292:411–444, 1992.
- [63] E. Zehnder J. Moser. *Notes on Dynamical Systems*. Courant Lecture Notes, New York, 2005.
- [64] A. Olvera F. Martínez-Farías, P. Panayotaros. Weakly nonlinear localization for a 1-d fpu chain with clustering zones. *European Physical*, 223:2943–2952, 2014.
- [65] V. I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer Verlag, New York, 1991.
- [66] M. Jiang. Symplectic transformations and periodic solutions of hamiltonian systems. *Mathematical Analysis and Applications*, 225:133–143, 1997.
- [67] S. K. Godunov. Stability of iterations of symplectic transformations. *Siberian Mathematical*, 30:54–63, 1989.
- [68] P. Panayotaros. Nekhoroshev stability of non-linear normal modes near an elliptic fixed point of a hamiltonian system with symmetry. http://www.ma.utexas.edu/mp_arc/papers/99-62, 1999.
- [69] S. J. Wright J. Nocedal. *Numerical Optimization*. Springer, New York, 1999.
- [70] J. A. Snyman. *Practical Mathematical Optimization*. Springer, New York, 2005.
- [71] L. R. Petzold U. M. Ascher. *Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations*. SIAM, Philadelphia, 1998.
- [72] J. C. Bucher. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. John Wiley & Sons Ltd, West Sussex, 2008.

- [73] R. von Schwering. *MultiBody System Simulation: Numerical Methods Algorithms and Software*. Springer Verlag, New York, 1999.
- [74] G. Wanner E. Hairer, C. Lubich. *Geometric Numerical Integration*. Springer, New York, 2006.
- [75] L. Verlet. Computer “experiments” on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard - jones molecules. *Physics Review*, 159:98–103, 1967.
- [76] S. A. Teukolsky W. H. Press. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, New York, 2002.
- [77] Q. Meng-zhao F. Kang. *The symplectic methods for the computation of Hamiltonian equations*. Computing Center Academia Sinica, Beijing, 1987.
- [78] J. M. Sanz-Serna. *Numerical Hamiltonian Problems*. Chapman & Hall, London, 1994.
- [79] W. A. Lester Jr. De vogelaere’s method for the numerical integration of second-order differential equations without explicit first derivatives: Application to coupled equations arising from the schrödinger equation. *Computational Physics*, 3:322–326, 1968.
- [80] R. Folk I. P. Omelyan, I. M. Mryglod. Optimized forest-ruth- and suzuki-like algorithms for integration of motion in many-body systems. *Computer Physics Communications*, 146:188–202, 2002.
- [81] J. Waters J. Ford. Computer studies of energy sharing and ergodicity for nonlinear oscillator systems. *Mathematical Physics*, 4:1293–1306, 1963.
- [82] S. Ruffo T. Cretegnny, T. Dauxois. Localization and equipartition of energy in the β -fpu chain: Chaotic breathers. *Physica D*, 121:109–126, 1998.
- [83] G. Mishagin S. Flach, I. Kanakov. q-breathers in fpu-lattices—scaling and properties for large systems. *Modern Physics*, 21:3925–3932, 2007.
- [84] P. Van Mieghem. *Graph Spectra for Complex Networks*. Cambridge University Press, Cambridge, 2011.
- [85] L. Grady O. Lézoray. *Image Processing and Analysis with Graphs*. CRC Press, London, 2012.