

6
2 ej.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA DE MEXICO

Facultad de Ciencias

**La Transición al Caos en
un Péndulo Extensible**

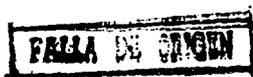
TESIS

Que para obtener el Título de:

FÍSICO

Presenta:

Ricardo Carretero González



México D.F. 1992



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 está 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.

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	1
2. CAOS DETERMINISTA	9
2.0 Introducción	9
2.1 Caos Determinista	9
2.2 Las Secciones de Poincaré	20
2.3 El Teorema KAM	26
2.4 Los Exponentes de Liapunov	28
2.5 Espectro de Potencias y Función de Autocorrelación	32
3. EL PÉNDULO EXTENSIBLE BIDIMENSIONAL	37
3.0 Introducción	37
3.1 Modelo Clásico de una Molécula de CO_2	37
3.2 El Péndulo Extensible Bidimensional	39
3.3 Desarrollo de Taylor a Tercer Orden para el Potencial	42
3.4 Ecuaciones de Movimiento	46
3.5 Casos Límite	47
4. UN CRITERIO PARA LA APARICIÓN DEL CAOS	52
4.0 Introducción	52
4.1 Evolución de una Pequeña Perturbación	52
4.2 Matriz de Evolución de la Perturbación	55
4.3 Valores Propios de la Matriz de Evolución de la Perturbación	57
4.4 Energía de Transición Orden-Caos en el Péndulo Completo	63
4.5 Energía de Transición Orden-Caos en el Péndulo Truncado	64
5. RESULTADOS Y CONCLUSIONES	67
5.0 Introducción	67
5.1 Integración Numérica	67
5.2 Primeras Evidencias	71
5.2.1 Trayectorias en el Espacio Físico y en el Espacio Fase	73
5.2.2 Evolución de Condiciones Iniciales Cercanas	75
5.2.3 Espectro de Potencias y Función de Autocorrelación	78
5.3 Secciones de Poincaré	82
5.3.1 Secciones de Poincaré del Péndulo Completo	83
5.3.2 Secciones de Poincaré del Péndulo Truncado	88
5.4 Exponentes de Liapunov	102
5.4.1 Exponentes de Liapunov del Péndulo Truncado	110
5.5 Resultados Finales y Conclusiones	115
Referencias	119

INTRODUCCIÓN

Durante las últimas décadas, la mecánica clásica ha adquirido un nuevo auge gracias al caos. A principios de siglo, cuando se fundamentó la mecánica cuántica, se pensó que la mecánica clásica había pasado a segundo plano, pero ahora, con el descubrimiento del caos, se ha tenido que reconsiderar el papel de la mecánica clásica.

Antes se pensaba que los sistemas clásicos seguían una dinámica simple (regular) ya que, en principio, las trayectorias están bien definidas cuando se dan las condiciones iniciales. Esto diferenciaba esencialmente la mecánica clásica, que es determinista, de la mecánica cuántica, que es, a final de cuentas, una descripción probabilística. Esto último se debe a que, aunque las ecuaciones en la mecánica cuántica son deterministas, la interpretación de los resultados introduce nociones estadísticas. Al desarrollarse el cálculo numérico mediante de herra-

mientas poderosas, las computadoras, la gente se dió cuenta de que los sistemas dinámicos clásicos podían ser impredecibles, aunque sus ecuaciones de movimiento fuesen completamente deterministas.

¿Porqué un sistema dinámico clásico puede ser impredecible si la mecánica clásica es determinista? En principio, dadas las condiciones iniciales, se puede conocer el comportamiento a futuro de un sistema si se resuelven las ecuaciones de movimiento, lo cual puede ser una tarea difícil pero nunca imposible (siempre se puede recurrir a la integración numérica con la ayuda de una computadora). El hecho de no poder predecir la evolución de un sistema dinámico proviene de la alta sensibilidad a las condiciones iniciales. Un ejemplo de esto son las conocidas ecuaciones de Lorenz (Lorenz, 1963) que son un modelo simplificado para la evolución del clima. La solución de estas ecuaciones muestra una gran sensibilidad a las condiciones iniciales. Este fenómeno fue llamado en su tiempo el "efecto mariposa" por el mismo Lorenz, ya que él lo ilustraba diciendo que bastaría la perturbación provocada por el aleteo de una pequeña mariposa para cambiar completamente el resultado de una predicción basada en las ecuaciones de Lorenz. Este fenómeno fue bautizado como caos, y este término fue utilizado por primera vez en un artículo de Li y Yorke (1975).

A partir de entonces, muchas miradas se desviaron hacia el nuevo fenómeno que se presentaba en la mayoría de los sistemas dinámicos: dadas dos condiciones iniciales muy cercanas, tan cercanas como se desee, a la larga, la evolución del sistema puede ser completamente distinta para ambas. Esto va en contra de nuestra intuición, aunque ésta se basa en la lógica de una mecánica determinista.

¿Porqué algunos sistemas dinámicos se comportan así? Sería interesante conocer alguna receta que nos dijese si el sistema va a presentar un comportamiento

caótico, pero, por el momento, no se conoce ninguna. De las pocas cosas que se saben acerca de la irregularidad de un sistema es que para que exista caos se requiere que las ecuaciones de movimiento no sean lineales, ya que, de serlas, el sistema se comportará de manera completamente regular. Esto se debe a que, si las ecuaciones de movimiento son lineales, éstas se pueden integrar analíticamente, obteniendo así una solución explícita que nos da la evolución temporal de las variables dinámicas del sistema. Para un sistema cuyas ecuaciones de movimiento no sean lineales, no será nada fácil predecir si el comportamiento de éste va a ser caótico o no. Es más, el comportamiento de la mayoría de los sistemas puede ser caótico para ciertos valores de sus parámetros y puede no serlo para otros valores de éstos, lo que complica todavía más las cosas. Lo mismo pasa desde el punto de vista de las condiciones iniciales: para valores fijos de los parámetros del sistema, ciertas condiciones iniciales dan lugar a movimientos regulares, mientras que otras pueden resultar en movimientos caóticos.

En este trabajo vamos a estudiar un sistema particular en el que ocurre una transición al caos: el péndulo extensible bidimensional, que es una generalización del péndulo inextensible. Se trata entonces de un péndulo que en lugar de tener una cuerda de longitud fija tiene un resorte que se puede estirar y comprimir. La manera en que aparece el caos en este sistema es un tanto singular: a bajas energías presenta únicamente movimientos regulares; al incrementar la energía y sobrepasar un cierto valor crítico, E_c , empiezan a aparecer algunas trayectorias caóticas, hasta que llega el momento en que la mayor parte de las condiciones iniciales dan lugar a trayectorias caóticas. A esta transición de movimientos regulares a trayectorias caóticas se le llama transición orden-caos. Pero esto no es todo: una vez que este sistema sufre la transición orden-caos y se incrementa todavía más la energía,

pasa de nuevo a ser ordenado; es decir, que sufre ahora una transición caos-orden. El sistema presenta una doble transición orden-caos-orden al aumentar la energía. Como se verá más adelante, los parámetros del péndulo extensible, masa, constante del resorte, longitud en reposo del resorte y fuerza gravitacional, se pueden reducir a un solo parámetro adimensional, f , que tiene que ver con las frecuencias naturales de oscilación del péndulo inextensible y de oscilación armónica del resorte. Es justamente el acoplamiento de los movimientos pendular y oscilatorio lo que da lugar a un sistema que no es lineal.

El péndulo extensible ya ha sido estudiado con anterioridad como un ejemplo típico de un sistema no lineal (Breitenberger y Mueller 1981, Tsel'man 1970, Narkis y Angrew 1977 y Kane y Khan 1968). Este sistema también se puede ver como el análogo clásico del término que produce la resonancia de Fermi en el espectro Raman del CO_2 y de algunas moléculas semejantes (Califano 1976 y Pippard 1983). Inclusive se le puede encontrar en problemas de dinámica celeste (Broucke y Baxa 1973, Contopoulos 1963 y Hori 1966).

El objetivo de este trabajo es obtener una estimación de la energía crítica para la transición orden-caos en el péndulo extensible. Para esto usaremos el criterio propuesto por Toda-Bolotin (Toda 1974, Bolotin 1989) para encontrar dicha energía crítica de transición. El método se basa en encontrar las regiones de curvatura gaussiana negativa del potencial y determinar la energía mínima para la cual el sistema puede alcanzar algún punto de dichas regiones. Esa energía será justamente la estimación de la energía crítica de transición. Luego, para la segunda transición, caos-orden, se buscará el valor máximo de energía que mantenga al sistema dentro de las regiones de curvatura gaussiana negativa del potencial. Supondremos que ahí sucede la transición caos-orden, o que al menos ahí empieza

a disminuir al caos. Veremos qué tan buenas resultan estas estimaciones comparándolas gráficamente con las secciones de Poincaré y, de forma más precisa, con los exponentes de Liapunov calculados numéricamente.

Existen trabajos previos acerca del caos en el péndulo extensible (Nuñez-Yépez *et al.*, 1990, y Cuerno *et al.*, 1992). Centraremos este estudio en el análisis del desarrollo a tercer orden del potencial del péndulo extensible, cuestión en la que no se ha ahondado previamente. Pondremos a prueba el criterio de Toda-Bolotin para el potencial del péndulo en la aproximación a tercer orden, para distintos valores del parámetro f . Se le da mayor énfasis a la transición orden-caos, ya que el potencial truncado a tercer orden sólo exhibe esa transición. Esto se debe a que el potencial truncado se parece mucho al potencial completo a bajas energías, pero a altas energías los potenciales difieren considerablemente. Es más, como veremos más adelante, el potencial completo es confinante (la partícula sujeta al potencial del péndulo no se puede escapar al infinito) a cualquier energía, en cambio, el potencial truncado no lo es a altas energías (a partir de cierta energía la partícula queda libre de la acción del potencial y se escapa).

El análisis del potencial truncado a tercer orden tiene gran interés, ya que surge en el estudio clásico de las vibraciones intramoleculares de algunas moléculas al hacer un desarrollo de Taylor del potencial molecular (Kuzmin y Stuchebrukhov 1989). La aproximación del potencial por una serie de Taylor nos da lugar a una suma de osciladores armónicos independientes en todas las direcciones, mas términos de acoplamiento que serán más significativos cuanto más energía tenga la molécula. Estos términos son los responsables de la no linealidad del potencial, ya que involucran sumas de potencias de las variables de posición, así como productos de éstas últimas, lo que da lugar a un acoplamiento entre los distintos

modos de oscilación. Si la energía es baja estos términos son despreciables, pero si se aumenta la energía estos términos serán cada vez mayores, por lo que se puede esperar un comportamiento cualitativamente distinto. Por ello nos interesa estudiar la estabilidad del potencial truncado del péndulo: pese a ser un sistema aparentemente sencillo, nos puede ayudar a entender el fenómeno del caos en sistemas con potenciales de tipo intramolecular. Cabe mencionar que el estudio que se hace en este trabajo se centra en sistemas hamiltonianos conservativos (donde la energía se conserva), y no se tratan sistemas disipativos (donde la energía no se conserva). Por lo que estaremos trabajando con *caos hamiltoniano* y no con *caos disipativo*.

La transición de orden a caos fue observada por primera vez en “experimentos” numéricos realizados por Hénon y Heiles (Hénon y Heiles 1964) en un sistema de dos osciladores con una interacción cúbica. En este experimento se notó, en concordancia con el teorema KAM que comentaremos más adelante, que a bajas energías los movimientos eran cuasiperiódicos, y que las trayectorias estaban confinadas a toros embebidos en un espacio fase n -dimensional. Donde n es el número de grados de libertad dinámicos del sistema, que es justamente el doble del número de grados de libertad espaciales. Se observó que a partir de cierto valor de la energía, E_c , los toros se destruían o se bifurcaban: los toros se subdividían para convertirse cada uno en 2 nuevos toros, que a su vez se convertían en 4 y así sucesivamente. Este proceso de ruptura de los toros sucedía tan rápido que un incremento mínimo en la energía producía innumerables bifurcaciones, y el espacio fase se convertía en una mezcla intrincada de toros (como un plato de macarrones) cada vez más pequeños. De esta forma, un corte bidimensional de ese espacio n -dimensional pasaba de mostrar elipses deformadas (que se obtienen de

cortar con un plano bidimensional al toro n -dimensional) a mostrar un complicado mar de puntos aislados.

Estos cortes bidimensionales son llamados secciones de Poincaré; fueron utilizadas por primera vez por Henri Poincaré (1845-1912), y son muy útiles en el estudio de la dinámica de los sistemas Hamiltonianos. En sistemas moleculares, el surgimiento de vibraciones caóticas en las moléculas, se refleja a nivel de su espectro de potencias. El espectro de las vibraciones de una molécula cuyas trayectorias son estables es discreto, en cambio, el espectro de esa misma molécula a altas energías ($E > E_c$) es continuo debido a que las trayectorias son caóticas.

En este trabajo no vamos a tratar el problema cuántico análogo. Sin embargo, en la mecánica cuántica existe también una energía crítica a partir de la cual la dinámica molecular cambia cualitativamente y el espectro se vuelve cuasicontinuo. Esto proviene de un cambio importante en la naturaleza de los eigenestados del Hamiltoniano. A bajas energías ($E < E_c$), los eigenestados difieren muy poco de un producto de osciladores armónicos, en cambio, a altas energías ($E > E_c$), los eigenestados son una mezcla de un gran número de estados de osciladores armónicos con energías muy parecidas, lo que ocasiona la cuasicontinuidad en el espectro.

Este trabajo está dividido en 5 capítulos. En el capítulo 2 se da un panorama general acerca de lo que es el caos y de dónde proviene, y se presentan las herramientas que son utilizadas en lo subsecuente para el estudio de la estabilidad de los sistemas. El capítulo 3 describe los dos sistemas físicos que vamos a analizar: el péndulo extensible con su potencial completo (que llamaremos, para abreviar, el péndulo completo) y el péndulo extensible con el potencial expandido en serie de Taylor a tercer orden (péndulo truncado). En el capítulo 4 se estudia el criterio

para la transición orden-caos y se calculan las energías de transición para ambos casos. Finalmente, en el capítulo 5, se muestran los resultados numéricos que se obtuvieron y se comparan con la estimación de la energía crítica de transición orden-caos.

CAOS DETERMINISTA

2.0 Introducción

En este capítulo daremos una introducción general sobre lo que es el caos y cuándo aparece. Definiremos las herramientas necesarias con las cuales vamos a trabajar en lo que sigue. Veremos lo que son las secciones de Poincaré, los exponentes de Liapunov, la función de autocorrelación y los espectros de potencias, y explicaremos de que manera se relacionan con la estabilidad de un sistema dinámico.

2.1 Caos Vs. Determinismo

Todos sabemos que jugar a la lotería, lanzar un dado o simplemente “echarse un volado” son procesos que tienen resultados completamente azarosos, es decir, que no los podemos predecir por más que nos esforcemos. Sin embargo, mucha

gente piensa que sistemas más complejos, como el clima o la bolsa de valores, pueden ser predecibles aun cuando son procesos que tienen comportamientos inesperados y que tienen una dinámica más compleja que la de un simple "volado".

La predictibilidad de un sistema es muy importante en la física (y en muchas otras ciencias), ya que, poder predecir un sistema significa poder determinar el estado en el que se encuentra en cualquier instante. En la física, los sistemas más conocidos, que pueden ser impredecibles a largo plazo, son sistemas hamiltonianos de la forma:

$$H = H_0(q_k, p_k) + \lambda H_1(q_k, p_k), \quad (2.1)$$

donde H_0 describe un sistema hamiltoniano analíticamente integrable, H_1 es el hamiltoniano de la perturbación y λ es un pequeño parámetro que nos da la magnitud con la que se va a perturbar. Para simplificar la notación usamos la forma abreviada (q_k, p_k) para los argumentos de los hamiltonianos que son en realidad $(q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N)$, donde N es el número de grados espaciales de libertad o $2N$ el número de grados dinámicos de libertad. Si N es grande, la mecánica estadística entrará en acción para intentar resolver el problema. ¿Y si N es chico podremos siempre usar la mecánica clásica? La experiencia nos dice que no, de hecho casi nunca. Basta recordar, por ejemplo, el problema de los 3 cuerpos, que como sabemos, no es resoluble analíticamente. Por lo mismo entendemos porqué nunca se ha usado una solución analítica para deducir las leyes de probabilidad en el lanzamiento de un dado, aún siendo un sistema muy sencillo a simple vista.

Vemos entonces que en la vida cotidiana existe una confusión o un cierto traslape en la relación azar-determinismo, ya que no nos extraña pensar que un lanzamiento de un dado es completamente azaroso, mientras tratamos de prede-

cir sistemas muchos más complejos como son el clima y la bolsa de valores. En términos físicos, el problema es saber si las soluciones de un sistema hamiltoniano específico van a tener un comportamiento de tipo azaroso o de tipo bien determinado. La gente tardó mucho tiempo, casi 300 años desde Newton, en atacar este problema. Ahora existe una nueva rama de la física-matemática, la dinámica no lineal, que trata de explicar los misterios más profundos de los hamiltonianos de la forma (2.1), donde $H_1(q_k, p_k)$ tiene términos no lineales en las q_k y las p_k (de ahí el nombre de dinámica no lineal).

Pasemos entonces a ver de qué forma podemos distinguir si el sistema con el que estamos tratando produce resultados azarosos (sistema caótico) o si tiene un comportamiento bien determinado o predecible (sistema ordenado). Para ello consideremos que el hamiltoniano que estamos tratando describe a un sistema de partículas, o a una sola partícula en algún potencial, y analicemos las trayectorias solución. ¿Cómo podemos definir si estas trayectorias son “azarosas” (trayectorias caóticas) o si están bien determinadas (trayectorias regulares u ordenadas)? En otras palabras: ¿Cuál es la diferencia esencial entre una trayectoria regular y una trayectoria caótica? La dinámica no lineal proporciona varias maneras de distinguir entre ambas situaciones, pero nosotros nos centraremos sobre todo en dos ideas básicas y muy ilustrativas. Una de ellas es seguir la evolución de dos condiciones iniciales muy cercanas y la otra se basa en averiguar cuál es la dimensión del espacio en el que vive la trayectoria (trataremos esta idea en la sección 2.2).

Veamos entonces una forma muy sencilla de definir una órbita caótica. Para esto consideremos el espacio donde “viven” todas las condiciones iniciales, con una misma energía, del sistema (superficie de energía constante), y hagamosle una partición en un número finito de pequeñísimas celdas que no se traslapan

entre sí. A cada una de estas celdas pongámosle una etiqueta o un número para identificarlas rápidamente. Entonces, para describir la evolución de una trayectoria basta dar la secuencia de etiquetas de las celdas por las cuales pasó la partícula a intervalos de tiempo constante. Con esta descripción, una trayectoria sería simplemente una secuencia de etiquetas o números. Claro está que esta descripción no es exacta, pero si quisiésemos describir con mayor precisión la evolución de dicha trayectoria, tendríamos que tomar una partición más pequeña sobre la superficie de energía. Ahora preguntémos: ¿Cómo se vería una trayectoria estable y como se vería una trayectoria caótica utilizando esta descripción? Para una trayectoria estable tendremos una secuencia de etiquetas con un patrón regular, en cambio, para una trayectoria caótica no se verá ningún tipo de patrón en la secuencia de etiquetas. Más concretamente, para una órbita estable podríamos predecir la celda siguiente simplemente inspeccionando la secuencia de etiquetas que llevaba la trayectoria, ya que de alguna forma el patrón en el que aparecen las etiquetas es regular y se puede intuir cuál va a ser la siguiente celda que va a ocupar la partícula. En cambio, para una trayectoria caótica, la sucesión de etiquetas es totalmente irregular, sin ningún orden aparente, por lo que tratar de predecir la secuencia de celdas que seguirá la partícula sería como tratar de adivinar en que número va a caer un dado.

Con ésto queda claro, por lo menos intuitivamente, la diferencia esencial entre una trayectoria caótica y una regular. Veamos las consecuencias que tiene esta idea de predecir la siguiente celda conociendo la secuencia anterior de celdas. Si conocemos perfectamente la sucesión de celdas que ocupó una trayectoria en el pasado, digamos hasta el tiempo t , ¿podremos decir qué celda va a ocupar la partícula en el tiempo $t + \Delta t$? La respuesta es obviamente sí, para una trayectoria

regular y no para una trayectoria caótica. En este último caso, no importa qué tan larga sea la lista de etiquetas que tengamos del pasado evolutivo de una partícula, nos será imposible predecir con exactitud cuales serán las siguientes celdas que ocupará. Al parecer esta ignorancia del futuro a mediano plazo (y por supuesto a largo plazo) radica en el hecho de que no sabemos con exactitud dónde estaba la partícula, lo cual a su vez proviene de la incertidumbre en la posición y velocidad que nos da el tamaño de la celda. Sin embargo, por extraño que parezca, no importa qué tan pequeña sea nuestra partición de las celdas, la evolución del sistema seguirá siendo impredecible para las trayectorias caóticas.

Podemos concluir que la evolución a futuro de una partícula, de la cual conocemos una buena parte de su pasado, no va a poder ser determinada por culpa de una propiedad intrínseca de esa trayectoria y no por la forma en la que estemos describiendo nuestro sistema. Por otro lado, para una trayectoria regular no tendremos ese problema: podremos predecir el futuro de una partícula si conocemos su pasado. Por lo tanto, para un sistema físico que tiene comportamiento caótico, no importa qué tantas ni qué tan precisas sean las mediciones que hagamos sobre él, nos va a ser imposible determinar el estado en el que se encuentre en el futuro. Con esto vemos que el determinismo en la mecánica clásica puede ser sólo un sueño inalcanzable en la práctica, y cabe recalcar que esto no depende de qué tan precisos sean nuestros aparatos de medición: para conocer la evolución de un sistema caótico necesitaríamos determinar sus condiciones iniciales con precisión infinita y tener un algoritmo que integrara las ecuaciones de movimiento también con precisión infinita; como esto no es así, no se puede predecir su evolución.

Como podemos constatar, la precisión en las condiciones iniciales es un factor determinante para conocer el futuro evolutivo de un sistema. Entre más pre-

cisos sean los datos de las condiciones iniciales, podremos conocer más a futuro la evolución de un sistema. Por eso, veamos algunas ideas relacionadas con la precisión con la cual se puede especificar un número. Un número cualquiera puede ser expresado por una serie de unos y ceros (bits) por medio de algún algoritmo. Esta serie puede ser finita o infinita, dependiendo de la naturaleza del número que escogimos. Pensemos ahora en el algoritmo más eficiente que codifique, en el menor número posible de bits, una cantidad dada. Sea $K^{(n)}$ la longitud mínima de dicho algoritmo, que calcula los n bits de dicha cantidad. Esta $K^{(n)}$ se define como la complejidad de dicho número. Notemos que $K^{(n)}$ no puede ser mucho más grande que n ya que un algoritmo posible para imprimir una secuencia G_k de n dígitos es: imprime G_1 , imprime G_2, \dots , imprime G_n . Este algoritmo tiene una complejidad muy cercana a n (por lo menos proporcional) para n grande, y obviamente no es el algoritmo más eficiente. Por lo tanto, la complejidad de un número de n dígitos nunca va a rebasar por mucho a n . Llamemos complejidad máxima a la complejidad del algoritmo más eficiente. Intuitivamente es lógico suponer que, si n crece, entonces $K^{(n)}$ también crece, por lo que si intentamos calcular la complejidad de un número cuya serie de dígitos es infinita, vamos a estar en problemas porque ésta va a ser infinita también. Por eso se define la complejidad de una serie infinita de dígitos como:

$$K \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{K^{(n)}}{n}. \quad (2.2)$$

A K se le suele llamar la complejidad algorítmica y se le puede relacionar con la llamada entropía de Kolmogorov.

Comparemos la complejidad algorítmica de un número formado por una infinidad de cifras que fueron escogidas al azar con otro cuyas cifras mantienen cierto orden. Obviamente la complejidad algorítmica del número formado por la serie

de dígitos escogidos al azar va a ser mayor que la del otro número. Es más, justamente se definirá una serie como aleatoria cuando el límite de la ecuación (2.2) sea distinto de cero. Por otro lado, si para un número dado el límite de la ecuación (2.2) es cero, entonces existirá un algoritmo finito para desarrollarlo en bits, y esto sucederá cuando los dígitos de dicho número estén relacionados (es decir que no fueron escogidos al azar). Con esta definición podemos decir que una trayectoria caótica es aquella en la que la serie de etiquetas de las celdas por las cuales pasa tiene una complejidad algorítmica distinta de cero y diremos que una trayectoria es regular en caso de que la complejidad algorítmica sea cero.

Según lo discutido, describir numéricamente un sistema mecánico es complicado, incluso desde la manera en la cual podemos representar sus cantidades dinámicas. Este problema reside en el hecho de que la mayoría de los números reales tiene una complejidad algorítmica distinta de cero, *i.e.* necesitamos un algoritmo infinito para poder representarlos. Es más, para ser exactos, el conjunto de los números reales con $K = 0$ (números que sí pueden ser descritos con un algoritmo finito) tiene medida cero. Por esta razón, la dinámica de un sistema no lineal no va poder ser pronosticada cuando exista caos: porque si lo intentáramos tendríamos la necesidad de usar algoritmos infinitos para poder manejar todos los valores reales que toman sus variables dinámicas. Entonces, la teoría de la complejidad nos dice que los números con los cuales podemos trabajar en la práctica son muy escasos. Es más, en la práctica el continuo de los números reales no existe, es mera ficción, debido a que casi todos ellos están fuera de nuestro alcance. Concretamente, el conjunto de los números irracionales que tienen $K \neq 0$ tiene medida distinta de cero, por lo que la mayoría de ellos pueden considerarse como ajenos al mundo físico; de ahí que el nombre de "irracionales" sea tan adecuado.

Recordemos que todo esto proviene de la incapacidad que tenemos de resolver analíticamente la mayoría de las ecuaciones diferenciales no lineales, por lo que tenemos que recurrir al análisis numérico con las computadoras.

Ahora podemos preguntarnos ¿Qué es lo que necesita tener de especial nuestro sistema para que dé origen a órbitas caóticas? Pensemos primero en los dados. En este juego ponemos los dados en un cubilete y los agitamos varias veces. Los dados sufren un gran número de choques dentro del cubilete y “pierden memoria” de cuál era su estado inicial. De esta forma, cuando los lanzamos y se quedan inmóviles sobre la mesa, el resultado es impredecible. Lo mismo pasa en la lotería, donde hay tantas bolitas y tantos choques entre ellas que nos es imposible determinar cuál va a ser el número premiado. Siguiendo este esquema, muchos fenómenos físicos resultan ser azarosos por culpa del número tan grande de procesos elementales independientes que los conforman. Asimismo, el movimiento browniano de un pequeño granito de polen flotando en un líquido es completamente irregular gracias a que sufre una inmensidad de choques con las moléculas del líquido. De igual forma cabe mencionar la turbulencia en un fluido, que involucra un número muy elevado de partículas. Y así podemos seguir enumerando ejemplos donde la aparición del azar proviene del gran número de procesos elementales que están involucrados. Con todo esto es tentador decir que el caos proviene necesariamente de la existencia de un número elevado de grados de libertad. En un principio se pensó que así era, pero Henri Poincaré (1845-1912) empezó a notar que la existencia de soluciones caóticas no era provocada necesariamente por el número de grados de libertad. Sin embargo, no fue hasta la revolución del cálculo numérico con las computadoras, que se comprobó que aún sistemas aparentemente sencillos (sistema de Hénon y Heiles 1964, ver sección 2.2), con pocos grados de libertad,

presentan comportamientos caóticos.

Consideremos un ejemplo muy ilustrativo, conocido como “el corrimiento de Bernoulli”. Se toma inicialmente un número irracional entre 0 y 1, y a partir de él se repite la siguiente operación: se multiplica por dos, restándole 1 cada vez que el resultado sea mayor o igual que 1. Es decir que se aplicará la siguiente iteración:

$$X_{n+1} = (2X_n) \bmod 1. \quad (2.3)$$

Se puede observar que los números que aparecen en esta sucesión de iteraciones es totalmente indistinguible de una sucesión de números escogidos aleatoriamente.

Para que quede claro cómo funciona este sistema tomemos como condición inicial a $X_0 = 0.3125$. Usando la ecuación (2.3) obtenemos la sucesión: $X_1 = 0.625$, $X_2 = 0.25$, $X_3 = 0.5$, $X_4 = 0$, $X_5 = 0$, $X_6 = 0$, ...

La secuencia resultó finita porque la “semilla” (X_0) fue racional. Es fácil encontrar la tasa a la que se pierde información en este proceso. (Por cierto, la entropía de Kolmogorov se puede interpretar como la tasa media de pérdida de información cuando una trayectoria pasa de una celda a otra). Basta escribir el número original en binario. Si para una fracción decimal X_0 se tiene

$$X_0 = 0 . a_1 \left(\frac{1}{10}\right)^1 a_2 \left(\frac{1}{10}\right)^2 \dots a_n \left(\frac{1}{10}\right)^n, \quad (2.4)$$

con a_i entre 0 y 9, entonces un número cualquiera entre 0 y 1 expresado en binario tendrá la forma

$$Y_0 = 0 . b_1 \left(\frac{1}{2}\right)^1 b_2 \left(\frac{1}{2}\right)^2 \dots b_n \left(\frac{1}{2}\right)^n, \quad (2.5)$$

con b_i entre 0 y 1. En particular, retomando la semilla anterior, $X_0 = 0.3125$ se convierte en $Y_0 = 0.0101$ ($= 0 \times 0.5 + 1 \times 0.25 + 0 \times 0.125 + 1 \times 0.0625$).

Ahora, multiplicar por 2 no es otra cosa que mover el punto (binario) un lugar a la derecha (ya que multiplicar por 2 la ecuación (2.5) es disminuir en 1 las potencias de $1/2$). Por lo que la serie de Y_i se ve como $Y_0 = 0.0101$, $Y_1 = 0.101$, $Y_2 = 0.01$, $Y_3 = 0.1$, $Y_4 = 0$, $Y_5 = 0$, ... En esta descripción resulta evidente que en cada paso se pierde una cifra: aquella que se desplaza a la izquierda del punto. Por lo tanto, en este proceso se pierde un bit de información en cada iteración.

Vemos claramente que si empezamos con una semilla racional llegaremos después de un cierto número de iteraciones al cero (en el caso de que la serie de cifras no sea infinita) o tendremos una serie periódica (en el caso de que la serie de cifras sea periódica). Si tomamos, por ejemplo, la secuencia que inicia con $Y_0 = 0.001001001001001 \dots$ que es periódica (de período 3) e infinita, tendremos que la serie Y_i será también periódica de período 3. Pero si tomamos como semilla a un número irracional, la serie de Y_i será una serie infinita y totalmente aperiódica (aleatoria). Este es un buen ejemplo en donde un algoritmo determinista, ecuación (2.3), lleva a resultados aleatorios. Vemos entonces que un proceso determinista lleva a resultados que se muestran azarosos, de esta forma podemos construir un generador de números aleatorios con un algoritmo determinista. A este tipo de caos se le llama *caos determinista*, ya que proviene de ecuaciones deterministas.

Por lo tanto, la idea de que un sistema tiene un comportamiento azaroso debido necesariamente al número de grados de libertad, es falsa. El ejemplo ya mencionado de las ecuaciones de Lorenz nos sirve para clarificar esta idea. Lorenz se preguntó porqué no se podía predecir el estado del tiempo con dos semanas de anticipación, si se conocían perfectamente las leyes de la hidrodinámica que determinan el movimiento de las nubes, la presencia de ciclones, anticiclones, depresiones

atmosféricas, etc. La dificultad de predecir el clima provenía de la enorme complejidad de las ecuaciones que resultaban de tomar en cuenta todos los fenómenos relevantes. Lorenz tuvo la habilidad para simplificar enormemente dichas ecuaciones y obtuvo un sistema de apenas 3 ecuaciones diferenciales acopladas. La sorpresa en ese entonces fue encontrar que aun esas 3 ecuaciones presentaban soluciones caóticas: una mínima variación en las condiciones iniciales daba lugar a escenarios completamente diferentes, después de integrar numéricamente las ecuaciones para un tiempo correspondiente a 2 semanas. Este caso mostró por primera vez que el caos puede provenir, intrínsecamente, de la naturaleza de las ecuaciones que rigen al sistema y no del número de variables involucradas en la descripción. Con esto resulta un hecho contundente que el caos puede aparecer en ecuaciones muy sencillas y, lo más importante, deterministas. En la actualidad la gente ya se está acostumbrando a pensar que el caos puede engendrarse en sistemas con pocos grados de libertad. En este trabajo, el sistema que vamos a estudiar tiene únicamente 4 grados dinámicos de libertad y las ecuaciones que lo describen son totalmente deterministas; sin embargo, la aparición del caos es inmediata.

Teniendo ya una idea más o menos clara de lo que es el caos determinista, pasemos a estudiar las distintas herramientas que se han inventado para decidir si los resultados de un sistema dinámico son caóticos o no. No es tan sencillo diferenciar una órbita caótica de una estable, aunque esto a veces se puede intuir a simple vista. Para evitar confusiones revisaremos a continuación varios métodos para comprobar la regularidad de las trayectorias.

2.2 Las Secciones de Poincaré

Como vimos en el capítulo 1, la primera vez que se observó la transición orden-caos fue con los experimentos de Hénon y Heiles (1964), cuando estudiaron específicamente el hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + q_1^2 + p_2^2 + q_2^2) + q_1^2 q_2 - q_2^3/3, \quad (2.6)$$

que es justamente de la forma (2.1) y es no lineal en q_1 y q_2 . Cuando la energía es suficientemente pequeña, el hamiltoniano (2.6) se parece mucho al de 2 osciladores armónicos desacoplados; al incrementar la energía del sistema los términos cúbicos de acoplamiento afectan cada vez más a las trayectorias. Hénon y Heiles se preguntaron acerca de la naturaleza de las constantes de movimiento del sistema. Como el sistema tiene 4 grados de libertad (x, y, \dot{x}, \dot{y}) , deben de existir 3 funciones:

$$I_j(x, y, \dot{x}, \dot{y}) \quad (j = 1, 2, 3) \quad (2.7)$$

que son constantes a lo largo de una trayectoria (*constantes de movimiento*); o lo que de otro punto de vista nos dice que la trayectoria está definida por las 3 ecuaciones:

$$I_j = C_j \quad (j = 1, 2, 3), \quad (2.8)$$

donde las C_j son 3 constantes. Cada una de las ecuaciones (2.8) representa una hipersuperficie en el espacio fase, y la trayectoria es la intersección de esas 3 hipersuperficies.

El problema surge cuando nos preguntamos si las constantes de movimiento I_j son *aislantes* o no. Una constante de movimiento que no es aislante da lugar a una hipersuperficie con una infinidad de capas que usualmente cubre densamente

el espacio fase, entonces para cualquier fin práctico la condición $I_j = C_j$ no nos da ninguna información, por lo que es como si no existiese tal constante. Por ello, las constante de movimiento que son aislantes se les suele llamar *integrales de movimiento*, y las que no son aislantes son simplemente ignoradas. En lo que sigue, cuando hablemos de constantes de movimiento nos estaremos refiriendo a integrales de movimiento, es decir que no tomaremos en cuenta las constantes de movimiento que no son aislantes. Se puede demostrar que en general, en un sistema hamiltoniano formado por una partícula en un potencial bidimensional, siempre existe una constante de movimiento que no es aislante, digamos I_3 . Por ser un sistema conservativo tendremos que la energía será una integral de movimiento que llamaremos I_1 . Ahora la pregunta es: ¿ Cual es la naturaleza de la constante de movimiento I_2 ?

Hénon y Heiles notaron que para que el hamiltoniano (2.6) tenga soluciones ordenadas se necesita que I_2 sea aislante. De esa manera, la trayectoria definida por las ecuaciones (2.8) debe vivir en una superficie bidimensional, ya que el sistema tiene dos constante de movimiento aislantes, I_1 e I_2 . Por otro lado, si el hamiltoniano presenta comportamiento caótico, entonces la única constante de movimiento que prevalece es la energía (I_1). Por lo que si la energía es la única constante de movimiento, entonces las trayectorias deben vivir en un espacio tridimensional (4 variables dinámicas menos 1 cantidad conservada) embebido en el espacio fase 4-dimensional. Aclarando las cosas, para un sistema con 4 variables dinámicas y donde la energía se conserva, se considerará caótica a una trayectoria si vive en un espacio tridimensional, y será regular si vive en un espacio bidimensional.

Hénon y Heiles integraron numericamente las ecuaciones de movimiento de su hamiltoniano (ya que no es posible integrarlas analíticamente) y obtuvieron

muchas trayectorias para varias energías y para varias condiciones iniciales. Obviamente, para saber si cada una de esas trayectorias vive en un espacio bidimensional o tridimensional, se necesita visualizarlas de algún modo. Sabemos que es imposible visualizar con precisión objetos en 3 dimensiones y mejor ni hablemos de espacios 4-dimensionales o mayores. Para darle la vuelta a este problema, lo que se grafica son los puntos de la trayectoria que intersectan al plano (q_1, p_1) . Ya que el sistema que se considera aquí tiene 4 variables dinámicas y se conserva la energía, nos quedan 3 grados de libertad, por lo que nos basta con fijar una variable dinámica para quedarnos con 2 dimensiones. La variable dinámica que se suele fijar es $q_2 = 0$, de esta forma decimos que estamos haciendo un corte con el plano (q_1, p_1) , y así ya podemos visualizar en una gráfica a este corte bidimensional. Veamos entonces como van a quedar estos cortes bidimensionales para trayectorias caóticas y para trayectorias regulares.

Si la trayectoria es regular, *i.e.* vive en un espacio bidimensional como vimos, entonces el corte de ésta con el plano (q_1, p_1) se verá como puntos que forman una curva (unidimensional) sobre ese plano. En cambio, si la trayectoria es caótica, *i.e.* vive en un espacio tridimensional, entonces el corte con el plano (q_1, p_1) se verá como una mancha de puntos distribuidos en una cierta area (bidimensional). Es justamente a este tipo de cortes que se les llama *secciones de Poincaré*. Entonces, basta con realizar una sección de Poincaré de una trayectoria para saber si esta última es caótica o no: si en la sección los puntos parecen formar una línea entonces la trayectoria es regular, pero si por lo contrario, los puntos en la sección aparecen esparcidos de manera que cubran una cierta región entonces la trayectoria es caótica. Una transformación a variables de ángulo y acción nos llevaría, para el caso ordenado, a una trayectoria que vive en un toro. A estas trayectorias

se les suelen llamar órbitas cuasiperiódicas y se verán como círculos deformados (cortes transversales de un toro) en la sección de Poincaré, figura (2.1).

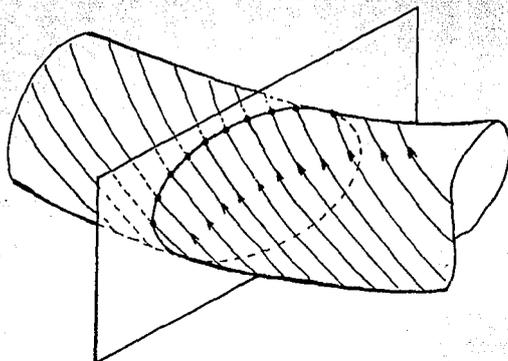


FIGURA 2.1. Corte transversal a una órbita cuasiperiódica, los puntos de corte forman un círculo deformado.

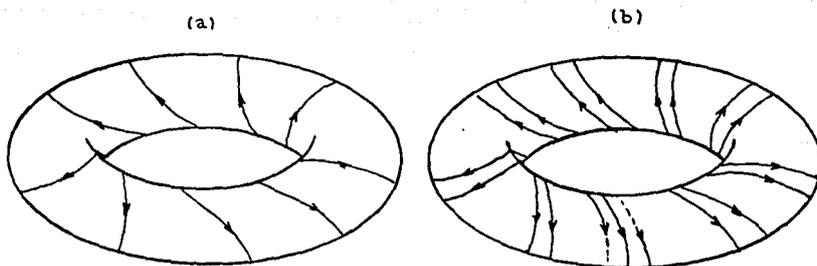


FIGURA 2.2. En el caso ordenado las trayectorias viven en toros y pueden ser: (a) periódicas (número de enrollamiento racional) o (b) cuasiperiódicas (número de enrollamiento irracional).

Por vivir en toros, estas trayectorias, van a tener dos periodos propios, uno con el cual se "enrolla" transversalmente en el toro y otro que le da la vuelta longitudinalmente. Definimos el *número de enrollamiento* como el cociente de las frecuencias asociadas a los dos periodos. Si el número de enrollamiento es racional, i.e. se puede escribir de la forma a/b , donde a y b son enteros, entonces la órbita será periódica, ya que si ésta da un número de vueltas igual al mínimo común múltiplo de a y b regresa al punto de partida, figura (2.2.a). Si por el contrario, el número de enrollamiento es un número irracional, entonces no importa qué tantas vueltas dé la trayectoria, nunca caerá sobre el mismo punto, figura (2.2.b). Una órbita regular con un número de enrollamiento irracional nunca se cierra y llena densamente el área del toro en el que vive, y por eso es que se llama órbita cuasiperiódica.

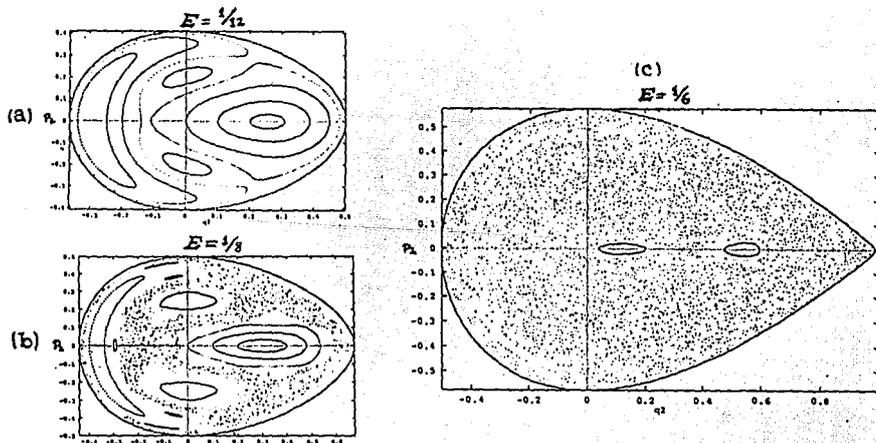


FIGURA 2.3. Secciones de Poincaré del sistema de Hénon y Heiles para distintos valores de la energía.

Analicemos las secciones de Poincaré que Hénon y Heiles obtuvieron para su sistema. La figura (2.3) muestra algunas secciones de Poincaré para distintas energías, cada una con varias trayectorias (varias condiciones iniciales). Estas secciones se hicieron pidiendo que $q_1 = 0$, por lo que obtenemos cortes en el plano (q_2, p_2) . Se puede observar que para una energía $E = 1/12$ cada trayectoria genera una curva unidimensional en la sección de Poincaré, indicando así que todas estas trayectorias (para esa energía) son regulares y que el hamiltoniano se asemeja mucho a un hamiltoniano integrable analíticamente. Para $E = 1/6$ Hénon y Heiles encontraron el asombroso resultado de que su sistema podía presentar un comportamiento caótico. Esto lo podemos observar en la figura (2.3) donde todos los puntos que ahí aparecen (para $E = 1/6$) fueron generados por una sola trayectoria. Esta última cubre casi toda el área del espacio fase, por lo que se puede deducir que es caótica. Para $E = 1/8$ se muestra cómo se lleva a cabo la transición de completamente ordenado ($E = 1/12$) a completamente caótico ($E = 1/6$), en esta sección de Poincaré se ve cómo existe una convivencia entre trayectorias caóticas y ordenadas. La sección obtenida para $E = 1/6$ nos hace pensar de alguna forma en el azar: si seguimos la evolución de la trayectoria y vamos graficando punto por punto en la sección de Poincaré nos damos cuenta de que, además de no existir coherencia espacial, tampoco existe coherencia temporal, es decir que los puntos aparecen "por todos lados" y a intervalos de tiempo irregulares, sin ningún orden especial. También se puede observar una diferencia en la evolución de dos condiciones iniciales muy cercanas: para $E = 1/12$ dos condiciones iniciales cercanas se separan linealmente con el tiempo, mientras que para $E = 1/6$ divergen exponencialmente.

Un ejemplo cotidiano en el cual se puede observar el fenómeno de divergencia

exponencial de condiciones iniciales cercanas es el cigarrillo. Es fácil observar que cerca de un cigarrillo todo el humo que sale de él está contenido dentro de un pequeño cilindro, es decir que todas las partículas de humo tienen condiciones iniciales cercanas. Ahora, si seguimos el humo lejos del cigarrillo nos podemos dar cuenta de que las partículas de humo se alejan rápidamente unas de las otras (se separan exponencialmente), a este fenómeno se le llama turbulencia y es un ejemplo muy ilustrativo de un comportamiento caótico.

2.3 El Teorema KAM

El teorema KAM (Kolmogorov, Arnold y Moser) es el teorema más preciso que se tiene hasta el momento acerca de la transición de un sistema regular a uno caótico, y aunque es completamente cualitativo, nos da una buena idea de la manera en la que aparece el caos.

Tomemos un hamiltoniano completamente integrable $H_0(q_k, p_k)$ y un hamiltoniano no lineal (no integrable) $H_1(q_k, p_k)$, y retomemos la ecuación (2.1) para construir un nuevo hamiltoniano:

$$H(q_k, p_k) = H_0(q_k, p_k) + \lambda H_1(q_k, p_k). \quad (2.9)$$

Donde λ es el parámetro de acoplamiento entre los dos hamiltonianos. Para $\lambda \ll 1$ tendremos que el hamiltoniano H_0 casi no va a ser perturbado por el hamiltoniano H_1 . Este sistema ya no será integrable analíticamente, pero por ser casi un hamiltoniano integrable y tener soluciones regulares (ya que no difieren mucho de las soluciones de H_0), diremos que es un hamiltoniano *cuasi-integrable*. Entonces, un hamiltoniano cuasi-integrable no podrá ser integrado analíticamente debido a

la perturbación no lineal, pero las órbitas serán todas cuasiperiódicas y vivirán en toros embebidos en el espacio fase dinámico. Si hacemos crecer a λ pero manteniéndolo pequeño, tendremos que el hamiltoniano H_1 va a perturbar cada vez más a H_0 , esto hará que los toros del espacio fase se “rompan” y aparezcan nuevos toros. Este proceso de ruptura continuará y tendrá como resultado que algunas órbitas pasen a ser caóticas. Todo esto es provocado por la interacción de la no linealidad del hamiltoniano H_1 ; conforme λ crece la interacción se vuelve más importante. La destrucción de los toros es provocada por la falta de constantes de movimiento: para el caso de un sistema 4-dimensional las órbitas cuasiperiódicas tienen 2 constantes de movimiento aislantes (la energía, I_1 , y otra extra, I_2), pero para las órbitas caóticas se tiene solamente una constante de movimiento que es la energía. Podemos entonces decir que la perturbación al hamiltoniano inicial, H_0 , nos “quita” integrabilidad al sistema, entre más grande sea λ más porción del espacio fase va a perder la constante de movimiento extra y la única constante que va a prevalecer será la energía. En resumen, el teorema KAM nos dice que a bajas energías tendremos órbitas regulares (círculos deformados en la sección de Poincaré) y que al ir aumentando la energía los toros se rompen y aparecen órbitas caóticas. Vemos entonces que los resultados obtenidos con el sistema de Hénon y Heiles, figura (2.3), cumplen con lo predicho por el teorema KAM: a bajas energías (cuando el sistema es cuasi-integrable) solo existen trayectorias cuasiperiódicas y conforme se aumenta la energía aparecen trayectorias caóticas (se pierde la integrabilidad del sistema).

2.4 Los Exponentes de Liapunov

Como vimos en la sección 2.1, una manera con la cual se puede ver si una trayectoria es caótica o no es fijándose en la evolución de dos condiciones iniciales muy cercanas. Si estas condiciones iniciales dan lugar a trayectorias que se separan una de la otra lentamente entonces el movimiento es regular. Pero si la separación entre las trayectorias crece muy rápidamente entonces nos va a ser imposible predecir el estado final de una condición inicial dada, ya que una incertidumbre muy pequeña en dicha condición inicial va a producir una incertidumbre enorme al transcurrir el tiempo. Por lo tanto, una manera de cuantificar qué tan caótica es una trayectoria es midiendo el crecimiento de la separación entre ésta última y otra trayectoria cercana. Para esto tomemos dos condiciones iniciales muy cercanas, \mathbf{x}_0 y \mathbf{x}_1 . Usaremos \mathbf{x}_i en lugar de $\mathbf{x}_i(q_k, p_k)$ para simplificar la notación. Sigamos la evolución de ambas condiciones iniciales y fijémonos en su diferencia:

$$\delta\mathbf{x}(t) \equiv \mathbf{x}_1(t) - \mathbf{x}_0(t). \quad (2.10)$$

$|\delta\mathbf{x}(t)|$ nos dirá como va a evolucionar la distancia, en el espacio fase, entre dos partículas que partieron de condiciones iniciales muy cercanas. Propongamos que la distancia entre las dos trayectorias crece exponencialmente con el tiempo:

$$\delta\mathbf{x}(t) \propto \exp(\lambda t). \quad (2.11)$$

Si definimos $\delta\mathbf{x}_0$ como la separación inicial entre las dos condiciones iniciales, entonces se sigue que

$$\delta\mathbf{x}(t) \propto \delta\mathbf{x}_0 \exp(\lambda t). \quad (2.12)$$

En la ecuación (2.12), λ nos dice qué tan rápido es el crecimiento exponencial entre las condiciones iniciales cercanas. Aunque λ sea muy pequeño, si es mayor

que cero, habrá una divergencia exponencial de las condiciones iniciales, lo cual da origen al caos. Despejando λ de la ecuación (2.12) se obtiene

$$\lambda \propto \frac{1}{t} \ln \frac{|\delta \mathbf{x}(t)|}{|\delta \mathbf{x}_0|}. \quad (2.13)$$

Entonces tendremos órbitas caóticas justamente cuando $\lambda > 0$. Hasta el momento hemos hablado de condiciones iniciales cercanas, pero no hemos especificado qué tan cercanas deben estar. Lo que se hace es tomar el límite cuando $|\delta \mathbf{x}_0| \rightarrow 0$:

$$\lambda \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{|\delta \mathbf{x}(t)|}{|\delta \mathbf{x}_0|}. \quad (2.14)$$

Tomando la ecuación anterior se definen los $2N$ exponentes de Liapunov, uno para cada una de las direcciones en el espacio fase, para un sistema hamiltoniano:

$$\lambda^{(i)} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{|\delta \mathbf{x}^{(i)}(t)|}{|\delta \mathbf{x}_0^{(i)}|}, \quad (2.15)$$

y se puede mostrar que este límite siempre existe. Tendremos entonces un exponente de Liapunov para cada una de las $2N$ direcciones en el espacio fase: $\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots, \lambda^{(2N)}$. Existen 3 posibles comportamientos para las condiciones iniciales cercanas (CIs) según los valores de los exponentes de Liapunov:

- $\lambda^{(i)} < 0 \Rightarrow$ las CIs se acercan exponencialmente en la dirección (i).
- $\lambda^{(i)} = 0 \Rightarrow$ las CIs no sufren cambio en la dirección (i).
- $\lambda^{(i)} > 0 \Rightarrow$ las CIs se alejan exponencialmente en la dirección (i).

Veamos algunas propiedades de estos exponentes. Sabemos que por ser un sistema hamiltoniano el volumen en el espacio fase se conserva (teorema de Liouville). Esto quiere decir que si tomamos un cierto volumen V de condiciones iniciales en el espacio fase y las dejamos evolucionar un cierto tiempo, éstas ocuparán un nuevo volumen V' . La conservación del flujo hamiltoniano nos dice que $V' = V$.

¿ Qué consecuencias trae esto sobre los exponentes de Liapunov? Tomemos un volumen inicial del espacio fase, muy pequeño, V_0 , y vemos cómo evoluciona con el tiempo. Como en cada una de las direcciones el crecimiento estará determinado por $\exp(\lambda^{(i)}t)$, entonces la evolución del pequeño volumen $V(t)$ con el tiempo estará dada por

$$V(t) = V_0 \exp(\lambda^{(1)}t) \exp(\lambda^{(2)}t) \cdots \exp(\lambda^{(2N)}t) \quad (2.16)$$

$$\Rightarrow V(t) = V_0 \exp(\lambda^{(1)} + \lambda^{(2)} + \cdots + \lambda^{(2N)})t. \quad (2.17)$$

Pero, como dijimos, el volumen se conserva, por lo tanto $V(t) = V_0$ para cualquier t , lo que implica de la ecuación (2.17) que la suma de todos los exponentes de Liapunov debe ser cero:

$$\sum_{i=1}^{2N} \lambda^{(i)} = 0 \quad (2.18)$$

También se puede demostrar que uno de los exponentes de Liapunov tiene que ser forzosamente cero: tomemos los ejes coordenados en el espacio fase que tienen siempre una dirección alineada (tangente) con el movimiento. De esta forma, el exponente de Liapunov asociado a esa dirección tiene que ser cero ya que la deformación en el mismo sentido que la trayectoria no puede crecer exponencialmente. Por lo tanto, siempre existe un exponente de Liapunov igual a cero. También se puede demostrar que los exponentes de Liapunov aparecen por pares, uno positivo y otro negativo, *i.e.* que para todo exponente de Liapunov $\lambda^{(i)}$ existe otro exponente de Liapunov $\lambda^{(j)}$, con $i \neq j$, tal que $\lambda^{(i)} = -\lambda^{(j)}$. Esta última propiedad se debe a que si en una dirección existe divergencia exponencial (exponente de Liapunov positivo), entonces en otra dirección tiene que haber una contracción exponencial (exponente de Liapunov negativo) para que se conserve el volumen en el espacio fase. A partir de estos resultados podemos decir que

siempre habrá dos exponentes de Liapunov iguales a cero ya que, como siempre hay uno igual a cero y siempre existe su negativo, éste último también es cero.

Veamos en particular el caso de sistemas hamiltonianos con 2 grados espaciales de libertad, i.e. 4 grados dinámicos de libertad. De entrada 2 de los exponentes de Liapunov son iguales a cero. Los 2 restantes serán uno el negativo del otro, por lo que en realidad sólo necesitamos conocer uno de los exponentes de Liapunov distinto de cero. Esto es justamente lo que reduce un poco el trabajo en sistemas con 4 variables dinámicas, ya que en vez de calcular 4 exponentes de Liapunov (uno para cada dirección) simplemente tenemos que calcular uno de ellos, digamos el positivo. Este exponente se calcula mediante la ecuación (2.14). Un caso todavía más particular son los sistemas de 2 grados dinámicos de libertad (sistemas hamiltonianos unidimensionales), en donde sólo existen 2 exponentes de Liapunov y, como siempre existen 2 exponentes iguales a cero, pues entonces éstos dos son cero. Esto es consistente con el hecho de que es imposible encontrar caos en sistemas hamiltonianos unidimensionales.

La noción de entropía de Kolmogorov se mencionó anteriormente definiéndola como la tasa media de pérdida de información. Usualmente se hace la suposición, relación de Pesin (Pesin 1977), de que la siguiente definición para la entropía de Kolmogorov es equivalente a la anterior:

$$K = \sum_{\lambda^{(i)} > 0} \lambda^{(i)} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2N} |\lambda^{(i)}|. \quad (2.19)$$

Por lo visto hasta el momento, ya podemos dar una medida cuantitativa de qué tan caótico es un sistema hamiltoniano. Queda claro entonces que la alta sensibilidad a las condiciones iniciales proviene de la divergencia exponencial de condiciones iniciales cercanas, esto se puede ejemplificar en la siguiente figura:

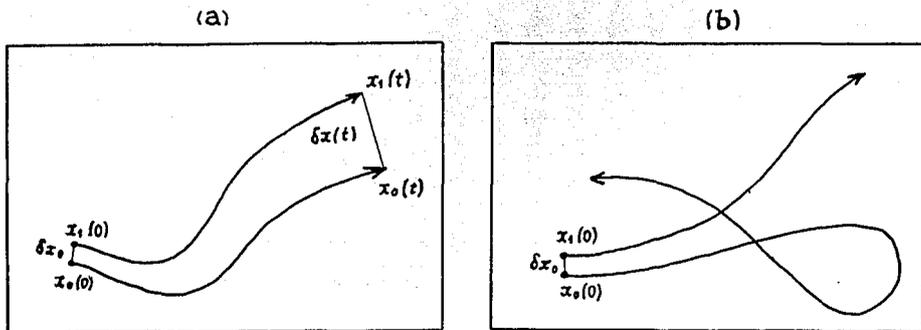


FIGURA 2.4. Evolución de dos condiciones iniciales muy cercanas: (a) órbitas regulares y (b) órbitas caóticas.

2.5 Espectro de Potencias y Función de Autocorrelación

Además de las secciones de Poincaré y de los exponentes de Liapunov, se puede recurrir a otros indicadores para detectar la presencia del caos. Uno de ellos es el *espectro de potencias* que es simplemente la norma al cuadrado de la transformada de Fourier (TF) de alguna de las variables dinámicas. Tomemos una trayectoria $\mathbf{x}(t)$ de un sistema con 4 grados dinámicos de libertad y escribamos explícitamente las dependencias temporales en cada una de las variables dinámicas ($q_1(t), q_2(t), p_1(t), p_2(t)$). Tenemos entonces 4 funciones que dependen del tiempo. Analicemos el comportamiento de estas funciones cuando la órbita es (a) periódica, (b) cuasiperiódica y (c) caótica.

(a) Para una trayectoria periódica todas las variables dinámicas tienen que ser periódicas y del mismo período. La TF de cualquiera de ellas nos dará, en el caso ideal, una delta de Dirac centrada en la frecuencia ω_0 correspondiente al período con el cual las variables dinámicas se repiten. Tratando con sistemas no integrables, la única forma de obtener la evolución de las variables dinámicas es numéricamente, por lo que siendo imposible aplicar la TF, tendremos que optar por la transformada discreta de Fourier (TDF). Haremos muestreos de alguna de las variables a intervalos de tiempo constantes, para obtener una serie de datos que serán sometidos a la TDF. Para una órbita periódica, la TDF no será una delta de Dirac estrictamente, sino una función que es cero en todo el espectro salvo en una región pequeña, alrededor de ω_0 , en donde habrá un “pico” muy pronunciado.

(b) Para una trayectoria cuasiperiódica, como su nombre lo indica, las variables dinámicas serán funciones cuasiperiódicas del tiempo. Es decir que no serán estrictamente periódicas, pero mostrarán un patrón repetitivo con cierta regularidad. Es como si tomásemos una función periódica y la “alargáramos” y “comprimiéramos” ligeramente en el eje temporal, por pedazos; lo que obtendríamos sería justamente una función cuasiperiódica. Realizando la TDF de una de estas funciones, obtendremos una función que es cero en todo el espectro salvo en una región alrededor ω_0 . En este caso dicha región será más grande que la obtenida con una órbita periódica, y además no contará con un único pico, sino que estará formada por un pico principal muy cercano a ω_0 y por picos subyacentes más pequeños a sus lados (ver figura (2.5.a)). Ya que no existe una frecuencia única con la cual se repiten las variables dinámicas, tenemos una frecuencia principal y otras frecuencias secundarias.

- (c) Una trayectoria caótica es tan irregular que la evolución temporal de sus variables dinámicas parece ser totalmente aleatoria, no existe ninguna frecuencia aparente con la que se repitan sus valores. Es más, si tomamos el tiempo entre máximos consecutivos de una variable dinámica obtendremos una lista de datos que es totalmente indiscernible de una sucesión aleatoria. Al tomar la TDF de una trayectoria caótica obtendremos una serie de picos distribuidos en casi todo el espectro, sin que exista ninguno predominante (figura (2.5.b)). Además, si tomamos diferentes trayectorias caóticas para una misma energía, veremos que los espectros de potencias asociados son completamente distintos.

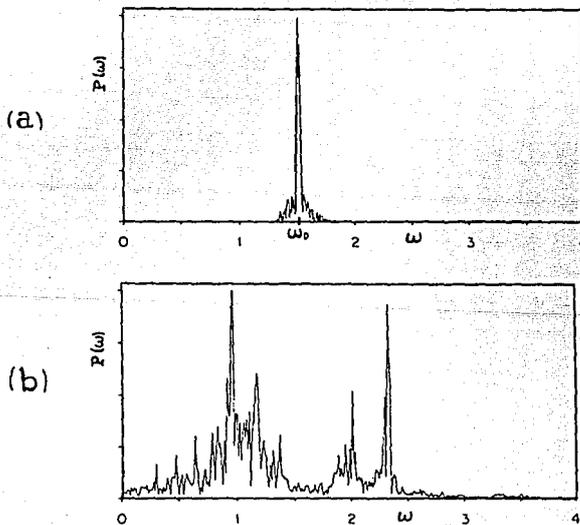


FIGURA 2.5. Espectro de potencias para (a) órbita cuasiperiódica y (b) órbita caótica, en el sistema de Hénon y Heiles.

Durante su evolución temporal, una trayectoria caótica va perdiendo información de su pasado, por lo que entre más tiempo haya transcurrido se vuelve más difícil decir donde estaba la partícula inicialmente. Existe una manera cuantitativa de calcular qué tanta información va perdiendo el sistema, para ello usamos la función de autocorrelación. La función de autocorrelación, como su nombre lo indica, da una medida de qué tan correlacionados están los valores de una serie de mediciones. En otras palabras, dice qué tanta información tiene el sistema comparada con la cantidad de información que tenía anteriormente. Por lo tanto, si la función de autocorrelación decrece estamos perdiendo información, y si crece estamos “ganando” información. Hay que recalcar que la “ganancia” de información se mide con respecto a la cantidad de información inicial, *i.e.* el sistema no puede tener en ningún momento más información que la que tenía en un principio.

La función de autocorrelación C , para una sucesión de valores $\{x_i\}_{i=1,\dots,n}$ se define como

$$C = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x'_i \cdot x'_{i+1}, \quad (2.20)$$

donde $x'_j \equiv x_j - \langle x \rangle$ y $\langle x \rangle \equiv \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k$. Pero esta forma de calcular la función de autocorrelación es muy poco operacional, por lo que se usa una manera alternativa para obtenerla. El teorema de Wiener-Khinchin (Champney 1987) dice que la función de autocorrelación de una serie de datos es igual a la transformada de Fourier del espectro de potencias de éstos. Por lo tanto se trata de la transformada de Fourier del cuadrado de la norma de la transformada de Fourier de los datos originales. Esto corresponde a:

$$C(x) = \text{TF}(P(x)) = \text{TF}\left(|\text{TF}(x)|^2\right), \quad (2.21)$$

donde $C(x)$ denota la función de autocorrelación, TF la transformada de Fourier

y $P(x)$ el espectro de potencias. En la práctica, como ya vimos, suele ser necesario substituir la TF por su versión numérica, TDF.

Con todos estos conceptos y herramientas, estamos listos para emprender el estudio de un sistema particular que presenta caos: el péndulo extensible bidimensional.

EL PÉNDULO EXTENSIBLE BIDIMENSIONAL

3.0 Introducción

En este capítulo analizaremos el modelo clásico de una molécula de CO_2 , que se puede ver también como un péndulo extensible bidimensional. El hamiltoniano original será expresado en términos de variables adimensionales para reducir todos los parámetros del sistema a uno solo. Veremos los límites para los cuales el sistema resulta completamente integrable, y finalmente construiremos un nuevo sistema, desarrollando el potencial del péndulo en una serie de Taylor a tercer orden.

3.1 Modelo Clásico de una Molécula de CO_2

Construyamos un modelo simplificado de la molécula de CO_2 . Consideremos primero la interacción entre el átomo de carbono y uno de los átomos de oxígeno. Dicha interacción se puede ver como la de dos masas unidas por un resorte. De

esta forma, tenemos un primer modo de vibración que es el modo de vibración de tipo armónico producido por un resorte. Tendremos entonces, para cada uno de los átomos de oxígeno, un resorte que los une con el átomo de carbono (figura (3.1.a)); falta tomar en cuenta la interacción entre los átomos de oxígeno. Como sabemos, en la molécula de CO_2 en reposo los enlaces covalentes del carbono con cada uno de los átomos de oxígeno forman un ángulo fijo. Si excitamos la molécula, ésta abandona su estado de reposo, y aparecen vibraciones, provocadas por la interacción entre los dos átomos de oxígeno, que harán que éstos se acerquen y se separen, con respecto a la posición de equilibrio. A este modo vibracional se le conoce como *modo torsional*, ya que es similar al de un péndulo construido con una barra flexible (figura (3.1.b)). Analicemos el movimiento de uno de los átomos de oxígeno con respecto al de carbono. Tenemos dos movimientos involucrados: uno provocado por un resorte y el otro de tipo pendular, por lo que se puede modelar la interacción carbono-oxígeno como un péndulo que, en vez de tener una cuerda con longitud fija tiene un resorte, figura (3.2).

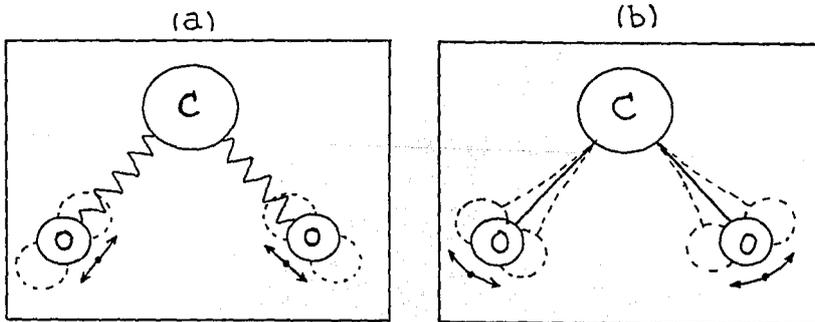


FIGURA 3.1. Modos vibracionales del modelo clásico de una molécula de CO_2 : (a) modo tipo resorte y (b) modo torsional.

Este modelo es muy utilizado ya que es el análogo clásico para la resonancia de Fermi para la molécula de CO_2 . Además resulta ser un buen modelo clásico de la mayoría de las moléculas triatómicas. De ahí parte el interés de conocer más a fondo su dinámica.

3.2 El Péndulo Extensible Bidimensional

Consideremos un resorte cuya constante de elasticidad es k y cuya longitud en reposo, antes de ser estirado, es l_0 ; de él cuelga una masa m . Sea l la longitud del resorte en reposo con la masa colgando. Entonces $k(l - l_0) = mg$, donde el lado derecho de esta ecuación corresponde al peso de la masa en el campo gravitacional, por lo que

$$l_0 = l - \frac{mg}{k}. \quad (3.1)$$

Definamos las frecuencias propias de oscilación de ambos modos:

$$\omega_s \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (3.2)$$

$$\omega_p \equiv \sqrt{\frac{g}{l}}, \quad (3.3)$$

donde ω_s es la frecuencia natural de oscilación del resorte con la masa m colgando, y ω_p es la frecuencia natural de oscilación del péndulo inextensible de longitud l . Definamos ahora el parámetro f como el cociente del cuadrado de estas frecuencias:

$$f \equiv \left(\frac{\omega_p}{\omega_s}\right)^2 = \frac{gm}{kl} = 1 - \frac{l_0}{l}. \quad (3.4)$$

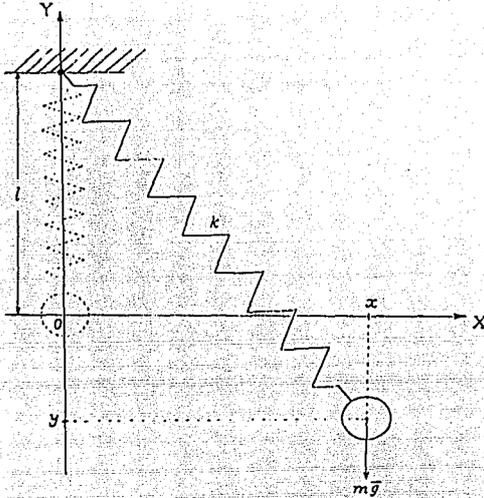


FIGURA 3.2. Péndulo extensible bidimensional.

Para contruir el hamiltoniano para este sistema, sean x y y las cordenadas cartesianas definidas en la figura (3.2), y sean p_x y p_y los momentos lineales respectivos. La energía cinética será entonces

$$T = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2). \quad (3.5)$$

El hamiltoniano está compuesto de tres partes: la energía cinética T , la energía potencial del resorte V_r y la energía potencial gravitacional V_g . La energía potencial del resorte será

$$V_r = \frac{1}{2} k \epsilon^2, \quad (3.6)$$

donde $\epsilon \equiv l_0 - L$, siendo L la distancia entre la masa m y el punto donde se fija el resorte, ver figura (3.2). La energía potencial gravitacional será simplemente

$$V_g = mgy, \quad (3.7)$$

donde y es la altura de la masa m con respecto al origen. Entonces el hamiltoniano

$$H = T + V_g + V_r \quad (3.8)$$

queda como

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + mgy + \frac{1}{2}k(l_0 - L)^2. \quad (3.9)$$

Pero $(l - y)^2 + x^2 = L^2$, entonces $\epsilon = l_0 - L = l_0 - \sqrt{(l - y)^2 + x^2}$, por lo que el hamiltoniano, en las coordenadas (x, y, p_x, p_y) , queda finalmente como

$$H(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + mgy + \frac{k}{2} \left(l_0 - \sqrt{(l - y)^2 + x^2} \right)^2. \quad (3.10)$$

Como podemos observar, en este hamiltoniano aparecen 5 parámetros: m , g , k , l_0 y l , obviamente no son todos ellos independientes (ecuación (3.1)). Nos gustaría reducir el número de parámetros para que el estudio del sistema sea menos engorroso. Para ello, vamos hacer un rescalamiento de algunas cantidades: daremos la energía en unidades de $m\omega_s^2 l^2 = kl^2$, las longitudes en unidades de l y el tiempo en unidades del período de oscilación natural del resorte ω_s^{-1} . Con esto definiremos nuevas variables: ξ para la energía, τ para el tiempo y q_i para las longitudes, es decir:

$$\text{Energía:} \quad E \longrightarrow \xi = E/kl^2,$$

$$\text{Longitudes:} \quad x_i \longrightarrow q_i = x_i/l,$$

$$\text{Tiempo:} \quad t \longrightarrow \tau = t \times \omega_s.$$

Para simplificar la notación, las únicas variables que van a ser renombradas son las de las longitudes ($x \rightarrow q_1, y \rightarrow q_2$) y los momentos ($p_x \rightarrow p_1, p_y \rightarrow p_2$). Para todas las demás (H, E, V, t) usaremos la misma notación, aunque hay que recordar que hicimos un reescalamiento. Después de un poco de álgebra se obtiene un nuevo hamiltoniano adimensional, que en las nuevas cordenadas, queda como:

$$H = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) + f q_2 + \frac{1}{2} \left(1 - f - \sqrt{(1 - q_2)^2 + q_1^2} \right)^2. \quad (3.11)$$

Como podemos observar, la adimensionalización redujo el número de parámetros del sistema, de 5, a uno solo que es f . Entonces, para estudiar la dinámica completa del péndulo extensible para todos los valores de sus parámetros, basta simplemente analizar la dinámica que genera el hamiltoniano adimensional (3.11) en función de un solo parámetro. Como vimos, los parámetros no eran independientes. O mejor dicho, era posible variar un solo parámetro, sin tocar los restantes, para obtener toda la gama posible de movimientos. Como podemos deducir de la ecuación (3.4) el parámetro f sólo puede tomar valores entre 0 y 1, ya que $l_0 \leq l$ y que $l_0 \geq 0$. Por lo tanto, todos los movimientos posibles del sistema van a ser alcanzados variando el valor de f entre cero y uno. Entonces en lo que sigue debemos recordar que $0 \leq f \leq 1$.

3.3 Desarrollo de Taylor a Tercer Orden para el Potencial

Como se ve de la ecuación (3.11), el potencial completo $V(q_1, q_2)$ es:

$$V(q_1, q_2) = f q_2 + \frac{1}{2} \left(1 - f - \sqrt{(1 - q_2)^2 + q_1^2} \right)^2. \quad (3.12)$$

El desarrollo de Taylor se hará a tercer orden porque a segundo orden los términos cruzados se hacen cero, lo cual nos deja con un hamiltoniano igual al de dos osciladores armónicos desacoplados. Desarrollaremos alrededor del punto de reposo

que es justamente $(q_1, q_2) = (0, 0)$. El desarrollo a tercer orden del potencial debe ser entonces de la forma:

$$\begin{aligned}
 V(q_1, q_2) = & V(0, 0) + \frac{\partial V}{\partial q_1} q_1 + \frac{\partial V}{\partial q_2} q_2 \\
 & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial q_1^2} q_1^2 + \frac{\partial^2 V}{\partial q_1 q_2} q_1 q_2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial q_2^2} q_2^2 \\
 & + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V}{\partial q_1^3} q_1^3 + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 V}{\partial q_1^2 q_2} q_1^2 q_2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 V}{\partial q_1 q_2^2} q_1 q_2^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V}{\partial q_2^3} q_2^3. \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

Cabe recalcar que las derivadas arriba escritas tienen que ser evaluadas en el punto $(q_1, q_2) = (0, 0)$. Después de evaluar las derivadas parciales, el potencial aproximado $V^{(3)}(q_1, q_2)$, que llamaremos *potencial truncado*, queda como:

$$V^{(3)}(q_1, q_2) = \frac{1}{2} (f q_1^2 + q_2^2 - (1-f) q_1^2 q_2 + f^2). \quad (3.14)$$

Por lo que el hamiltoniano del péndulo truncado será:

$$H^{(3)} = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2} (f q_1^2 + q_2^2 - (1-f) q_1^2 q_2 + f^2). \quad (3.15)$$

Entonces, el hamiltoniano (3.15) es una aproximación al hamiltoniano original (3.11). Ambos arrojarán resultados similares cuando las coordenadas (q_1, q_2) estén próximas al punto $(0, 0)$, ya que el desarrollo de Taylor fue hecho alrededor de ese punto. Como podemos notar, el origen es justamente el punto donde la energía es mínima (en reposo), por lo que la aproximación $H^{(3)}$ será más precisa mientras menor sea la energía. Entonces podemos adelantar hechos y decir que los resultados arrojados por ambos hamiltonianos deben de coincidir a bajas energías.

Por otro lado, a altas energías los dos hamiltonianos van a diferir considerablemente. Es más, serán completamente distintos: mientras que el hamiltoniano completo es *confinante* a cualquier energía, el hamiltoniano truncado no lo es

a altas energías. Veamos que significa esto de que el péndulo con el potencial truncado a tercer orden (que llamaremos *péndulo truncado*) no es confinante a altas energías. Un sistema es confinante cuando las partes que lo componen no se pueden alejar infinitamente entre ellas. Por el contrario, un sistema no es confinante si para valores grandes de la energía dichas partes se “desconectan” entre si, es decir que se alejan infinitamente y no vuelven a acercarse. Un ejemplo de un sistema que no es confinante es el del átomo: si se le da suficiente energía a uno de sus electrones, el átomo se ioniza y pierde a éste último.

Para saber si un sistema es confinante o no, debemos de buscar si existen puntos silla en el potencial. Si existen dichos puntos entonces el sistema no es confinante, ya que la partícula se puede “escapar” a travez de la región donde existe un punto silla. Para encontrar la energía máxima que puede tener el sistema sin que existan problemas de que la partícula se aleje infinitamente, necesitamos buscar la energía mínima para la cual se puede alcanzar un punto silla. Apliquemos este criterio para encontrar la energía máxima que puede soportar el péndulo truncado. Para ello debemos de encontrar los puntos silla del potencial, luego buscar el punto silla que tenga menor energía, y justamente esa será la energía máxima, E_{max} , que puede tener el sistema para seguir confinado. Nos interesa conocer esta energía ya que si le dieramos al sistema una energía mayor que E_{max} se podría llegar a un punto silla del potencial y entonces la masa m se “ionizaría” (con analogía con un átomo), es decir que se alejaría infinitamente del punto de reposo y no regresaría. Calculemos entonces esta E_{max} , buscando primero los puntos silla del potencial. Un punto silla de una función $g(x, y)$ de dos variables es un punto (x_0, y_0) tal que las primeras derivadas parciales evaluadas en (x_0, y_0) se anulen y que

$$g_{xx}(x_0, y_0)g_{yy}(x_0, y_0) - (g_{xy}(x_0, y_0))^2 < 0. \quad (3.16)$$

Para el potencial truncado, el criterio del punto silla se reduce, con la ecuación (3.16), a encontrar los puntos (q_1^*, q_2^*) tales que

$$(1-f)(q_1^*)^2 + q_2^* > \frac{f}{1-f}, \quad (3.17)$$

y tales que las derivadas parciales se anulen, es decir que:

$$\frac{\partial V}{\partial q_1} |_{(q_1^*, q_2^*)} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial V}{\partial q_2} |_{(q_1^*, q_2^*)} = 0. \quad (3.18)$$

Aplicando al potencial truncado esta condición se obtienen los puntos en donde la primera derivada vale cero:

$$q_1^* = \frac{\sqrt{2f}}{1-f} \quad \text{y} \quad q_2^* = \frac{f}{1-f}. \quad (3.19)$$

Los valores de q_1^* y q_2^* dados por la ecuación anterior cumplen con la ecuación (3.17), por lo tanto (q_1^*, q_2^*) es efectivamente un punto silla. Evaluando el potencial en este punto encontraremos E_{max} :

$$E_{max} = V^{(3)}(q_1^*, q_2^*) = \frac{f^2}{2(1-f)^2} + \frac{f^2}{2}. \quad (3.20)$$

Por otro lado notemos que la energía mínima, E_{min} que puede tener el sistema en ambos casos (truncado y completo) es la misma, ya que cerca del punto de reposo los dos hamiltonianos se parecen mucho, y vale:

$$E_{min} = H(0, 0, 0, 0) = H^{(3)}(0, 0, 0, 0) = \frac{f^2}{2}, \quad (3.21)$$

por lo que la ecuación (3.20) se puede reescribir como:

$$E_{max} = E_{min} + \frac{f^2}{2(1-f)^2}. \quad (3.22)$$

3.4 Ecuaciones de Movimiento

Para obtener las ecuaciones de movimiento usamos las ecuaciones de Hamilton:

$$\begin{aligned}\dot{p}_1 &= -\frac{\partial H}{\partial q_1}, \\ \dot{p}_2 &= -\frac{\partial H}{\partial q_2};\end{aligned}\tag{3.23}$$

$$\begin{aligned}\dot{q}_1 &= \frac{\partial H}{\partial p_1}, \\ \dot{q}_2 &= \frac{\partial H}{\partial p_2}.\end{aligned}\tag{3.24}$$

Para el péndulo completo se obtiene:

$$\begin{aligned}\dot{q}_1 &= p_1, \\ \dot{q}_2 &= p_2, \\ \dot{p}_1 &= (1-f)\frac{q_1}{\sqrt{q_1^2 + (1-q_2)^2}} - q_1, \\ \dot{p}_2 &= (1-f) - q_2 - (1-f)\frac{(1-q_2)}{\sqrt{q_1^2 + (1-q_2)^2}}.\end{aligned}\tag{3.25}$$

Estas ecuaciones son bastante complejas, por lo que su integración analítica no es factible. También cabe notar que estas ecuaciones son no lineales, lo cual indica que puede existir caos. Recordemos que ecuaciones de movimiento lineales implican necesariamente que el sistema es regular, pero que ecuaciones de movimiento no lineales NO implican necesariamente que exista caos en el sistema. Por lo que una no linealidad es condición necesaria pero no suficiente para la aparición del caos. En realidad no existe un criterio general para saber si un sistema va a presentar un comportamiento caótico o no, sin embargo en este trabajo se va a proponer un criterio que nos indique aproximadamente cuando es que va a aparecer el caos.

Realizando las operaciones equivalentes, con las ecuaciones de Hamilton (3.23) y (3.24) y el hamiltoniano (3.15), para el potencial truncado obtenemos otras ecuaciones de movimiento:

$$\begin{aligned}
 \dot{q}_1 &= p_1, \\
 \dot{q}_2 &= p_2, \\
 \dot{p}_1 &= (1-f)q_1q_2 - fq_1, \\
 \dot{p}_2 &= \frac{1-f}{2}q_1^2 - q_2.
 \end{aligned}
 \tag{3.26}$$

Podemos observar que las ecuaciones de movimiento para el potencial truncado (3.26) tampoco son lineales. Estas ecuaciones parecen ser mucho más simples que las ecuaciones de movimiento del péndulo completo (3.25), pero tampoco pueden ser integradas analíticamente (salvo para ciertos valores específicos de sus parámetros, ver la siguiente sección). Es importante recalcar que ecuaciones aparentemente sencillas, con pocos grados de libertad, como las ecuaciones (3.26), pueden generar órbitas caóticas.

3.5 Casos Límite

Veamos dos casos límites en los cuales las ecuaciones de movimiento se pueden integrar analíticamente: cuando $f = 0$ y cuando $f = 1$. Veamos primero el caso en el que $f = 1$, y analicemos lo que les pasa a las ecuaciones de movimiento para el péndulo completo y para el péndulo truncado.

Primero tratemos de entender lo que significa físicamente que $f = 1$. Sabemos que $f \equiv (\omega_p/\omega_s)^2$, por lo que $f = 1$ se traduce en $\omega_p = \omega_s$. Por lo tanto las frecuencias de oscilación son las mismas en ambos modos. Veamos como quedan

nuestras ecuaciones de movimiento después de tomar $f = 1$ en las ecuaciones (3.25):

$$\begin{aligned}\dot{q}_1 &= p_1, \\ \dot{q}_2 &= p_2, \\ \dot{p}_1 &= -q_1, \\ \dot{p}_2 &= -q_2.\end{aligned}\tag{3.27}$$

Estas son precisamente las ecuaciones de dos osciladores independientes (de-sacoplados) con frecuencias iguales a la unidad. Las órbitas solución estarán dadas por las funciones:

$$\begin{aligned}q_1(t) &= A \cos(t) + B \operatorname{sen}(t), \\ q_2(t) &= C \cos(t) + D \operatorname{sen}(t), \\ p_1(t) &= B \cos(t) - A \operatorname{sen}(t), \\ p_2(t) &= D \cos(t) - C \operatorname{sen}(t).\end{aligned}\tag{3.28}$$

Donde A, B, C y D son constantes que se definen al especificar las condiciones iniciales del sistema. Digamos que al tiempo $t = 0$ se dan las condiciones iniciales $(q_1(0), q_2(0), p_1(0), p_2(0))$, entonces $A = q_1(0)$, $C = q_2(0)$, $B = p_1(0)$ y $D = p_2(0)$. Con esto queda perfectamente determinada la evolución temporal de cualquier trayectoria del péndulo completo para $f = 1$. Entonces, para $f = 1$, las órbitas serán elipses con su centro en el origen.

• Péndulo truncado; $f = 1$:

Ahora usemos las ecuaciones de movimiento (3.26) del péndulo truncado y tomemos $f = 1$. Se puede ver rápidamente que se obtienen exactamente las

mismas ecuaciones de movimiento que para el péndulo completo. Por lo tanto todo lo dicho en el inciso anterior es también válido para el péndulo truncado. Cabe recalcar que los sistemas, péndulo completo y péndulo truncado, tienen ecuaciones de movimiento muy diferentes, sin embargo, cuando $f = 1$, éstas son iguales y dan origen a las mismas trayectorias (elipses centradas en el origen).

- Péndulo completo; $f = 0$:

Como en el caso $f = 1$, tratemos de entender lo que significa físicamente que $f = 0$. Recordemos nuevamente que $f \equiv (\omega_p/\omega_s)^2$, por lo que pedir que $f = 0$ tiene dos interpretaciones posibles: (I) $\omega_p \equiv \sqrt{g/l} = 0$ ó (II) $\omega_s \equiv \sqrt{k/m} \rightarrow \infty$. En el caso (I) tenemos otra vez dos posibilidades: (I.a) $g = 0$ ó (I.b) $l \rightarrow \infty$. Para el caso (II) las dos posibilidades son: (II.a) $k \rightarrow \infty$ ó (II.b) $m = 0$. Traduzcamos a palabras las ecuaciones anteriores: (I.a) no existe campo gravitacional, (I.b) la longitud de la cuerda es infinita, (II.a) la constante del resorte es infinita y (II.b) la masa de la partícula es cero.

Si comparamos todas estas proposiciones nos podemos dar cuenta de que en cierto modo son equivalentes. Por ejemplo, decir que no hay campo gravitacional, decir que la longitud de la cuerda es infinita, o decir que la masa de la partícula es cero nos lleva a un sistema en donde tenemos un resorte con una masa sin fuerza gravitacional. Por lo que las órbitas serán las mismas que las generadas por una masa amarrada a un resorte sobre una mesa horizontal sin fricción. Por lo que sin resolver las ecuaciones de movimiento, para el caso en el que $f = 0$, podemos deducir la forma de las trayectorias.

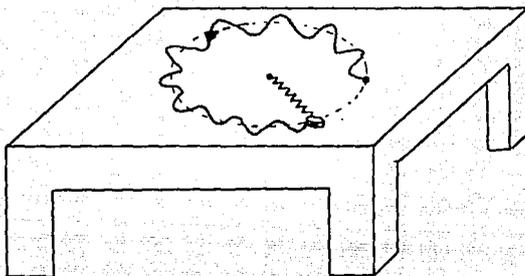


FIGURA 3.3. El péndulo con $f = 1$ se comporta como una masa atada a un resorte en una mesa sin fricción.

- Péndulo truncado $f = 0$:

En este caso resulta que el sistema no es confinante para ningún valor de la energía. Esto se puede observar de la ecuación (3.22): si hacemos $f = 0$ obtenemos que $E_{max} = E_{min}$. Por lo tanto, la energía máxima que admite el sistema (para seguir siendo confinante) es igual a la energía mínima que este puede tener. Lo que nos indica que no existe ninguna energía para la cual el sistema sea confinante, por lo que este caso carece de interés.

Con esto queda terminada la descripción del sistema al cual le vamos a estu-

diar su estabilidad. Ahora pasemos a la siguiente sección donde se explica detalladamente el criterio que se usó para la perdición de la energía crítica de transición orden-caos.

UN CRITERIO PARA LA APARICIÓN DE CAOS

4.0 Introducción

En este capítulo se presenta el criterio de Toda-Bolotin, para la predicción de la energía crítica de transición orden-caos en un sistema hamiltoniano; y se le aplica para calcular las energías críticas de transición en el péndulo completo y el truncado. Este criterio fue propuesto en los artículos de Toda (1974), Bolotin *et al.* (1989) y Núñez Yépez *et al.* (1990), sin embargo nunca se han hecho pruebas sistemáticas sobre su validez; por lo que los resultados de este trabajo mostrarán qué tan válido resulta el criterio de Toda-Bolotin, al menos para el péndulo extensible.

4.1 Evolución de una Pequeña Perturbación

La característica más importante que presentan los sistemas caóticos es la extrema sensibilidad a pequeños cambios en las condiciones iniciales, lo que, como

ya sabemos, quiere decir que la separación local entre trayectorias muy cercanas (en el límite en que la separación inicial entre las condiciones iniciales tiende a cero) aumenta en forma exponencial con el tiempo: $d(t) \propto \exp(\lambda t)$, con $\lambda > 0$. Por ello, nos interesa estudiar como va a diferir la evolución de dos condiciones iniciales muy cercanas. Estudiemos pues la evolución temporal de la distancia que separa a dos trayectorias que empezaron inicialmente muy cercanas.

Consideremos un sistema hamiltoniano con 4 grados dinámicos de libertad, y sea

$$H(q_1, q_2, p_1, p_2) = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) + V(q_1, q_2), \quad (4.1)$$

el hamiltoniano de este sistema. Si consideramos una trayectoria $\mathbf{x}(t)$, cuya condición inicial es $\mathbf{x}(0)$, obviamente $\mathbf{x}(t)$ tiene que cumplir con las ecuaciones de Hamilton:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{y} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (4.2)$$

por lo que:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = (\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dot{p}_1, \dot{p}_2) = \left(\frac{\partial H}{\partial p_1}, \frac{\partial H}{\partial p_2}, -\frac{\partial H}{\partial q_1}, -\frac{\partial H}{\partial q_2} \right). \quad (4.3)$$

De esta manera nos aseguramos que $\mathbf{x}(t)$ es efectivamente una trayectoria (solución a las ecuaciones de movimiento) del sistema. Ahora, hagamos una perturbación infinitesimal, $\delta\mathbf{x}(0)$, a la condición inicial $\mathbf{x}(0)$, obteniendo así una nueva condición inicial $\mathbf{x}'(0)$:

$$\mathbf{x}'(0) = \mathbf{x}(0) + \delta\mathbf{x}(0). \quad (4.4)$$

Sea $\mathbf{x}'(t)$ trayectoria engendrada por la condición inicial $\mathbf{x}'(0)$. Entonces, lo que nos interesa conocer es la separación, $\delta\mathbf{x}(t)$, entre las dos trayectorias en todo instante de tiempo. Esta separación se podrá calcular en todo instante de tiempo con:

$$\delta\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}'(t) - \mathbf{x}(t). \quad (4.5)$$

Para simplificar la notación y no estar cargando con las derivadas de las ecuaciones de Hamilton, definamos la función f de tal forma que al aplicarla a las variables de una trayectoria nos dé las derivadas de estas últimas. Es decir

$$f(\mathbf{x}(t)) \equiv \dot{\mathbf{x}}(t) = (\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dot{p}_1, \dot{p}_2). \quad (4.6)$$

Apliquemos entonces esta función f a la trayectoria $\mathbf{x}'(t)$, y usemos la ecuación (4.5) para escribir a $\mathbf{x}'(t)$ en función de la trayectoria original y de la perturbación:

$$f(\mathbf{x}') = f(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = \dot{\mathbf{x}} + \delta\dot{\mathbf{x}}. \quad (4.7)$$

La última parte de la ecuación (4.7) se pudo escribir gracias a que la función f es lineal ya que lo que hace es derivar y la derivación es una operación lineal. Cabe señalar que las dos trayectorias y la perturbación dependen del tiempo, pero para simplificar la notación hemos omitido la dependencia temporal.

Por otro lado, haciendo un desarrollo de Taylor de $f(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x})$, gracias a que $\|\delta\mathbf{x}\| \ll 1$, obtenemos:

$$f(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) \simeq f(\mathbf{x}) + \nabla f|_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{x} = \dot{\mathbf{x}} + \nabla f|_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{x}, \quad (4.8)$$

en donde $\nabla f|_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{x}$ es una matriz que debe de ser evaluada en la trayectoria.

Igualando (4.7) con (4.8) obtenemos la ecuación para la evolución de la perturbación:

$$\delta\dot{\mathbf{x}} = \nabla f|_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{x}. \quad (4.9)$$

Definiendo $\mathbf{M}|_{\mathbf{x}} \equiv \nabla f|_{\mathbf{x}}$, la ecuación (4.9) se puede reescribir como:

$$\delta\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{M}|_{\mathbf{x}} \cdot \delta\mathbf{x}. \quad (4.10)$$

Por lo tanto, la ecuación anterior contiene la información sobre la evolución temporal de la perturbación; solamente falta por conocer explícitamente la matriz $\mathbf{M}|_{\mathbf{x}}$, que llamaremos *matriz de evolución para la perturbación*.

4.2 Matriz de Evolución de la Perturbación

Escribamos la matriz M , usando la notación por coordenadas de

$$f(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), f_3(\mathbf{x}), f_4(\mathbf{x})) \quad (4.11)$$

así,

$$M|_x = \begin{pmatrix} \partial f_1/\partial q_1 & \partial f_1/\partial q_2 & \partial f_1/\partial p_1 & \partial f_1/\partial p_2 \\ \partial f_2/\partial q_1 & \partial f_2/\partial q_2 & \partial f_2/\partial p_1 & \partial f_2/\partial p_2 \\ \partial f_3/\partial q_1 & \partial f_3/\partial q_2 & \partial f_3/\partial p_1 & \partial f_3/\partial p_2 \\ \partial f_4/\partial q_1 & \partial f_4/\partial q_2 & \partial f_4/\partial p_1 & \partial f_4/\partial p_2 \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Pero como

$$(f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), f_3(\mathbf{x}), f_4(\mathbf{x})) = \left(\frac{\partial H}{\partial p_1}, \frac{\partial H}{\partial p_2}, -\frac{\partial H}{\partial q_1}, -\frac{\partial H}{\partial q_2} \right), \quad (4.13)$$

entonces la ecuación (4.12) queda como:

$$M|_x = \begin{pmatrix} \partial^2 H/\partial q_1 \partial p_1 & \partial^2 H/\partial q_2 \partial p_1 & \partial^2 H/\partial p_1^2 & \partial^2 H/\partial p_2 \partial p_1 \\ \partial^2 H/\partial q_1 \partial p_2 & \partial^2 H/\partial q_2 \partial p_2 & \partial^2 H/\partial p_1 \partial p_2 & \partial^2 H/\partial p_2^2 \\ -\partial^2 H/\partial q_1^2 & -\partial^2 H/\partial q_2 \partial q_1 & -\partial^2 H/\partial p_1 \partial q_1 & -\partial^2 H/\partial p_2 \partial q_1 \\ -\partial^2 H/\partial q_1 \partial q_2 & -\partial^2 H/\partial q_2^2 & -\partial^2 H/\partial p_1 \partial q_2 & -\partial^2 H/\partial p_2 \partial q_2 \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

Recordemos que todas las derivadas que aparecen arriba deben ser evaluadas sobre la trayectoria. Calculando las derivadas del hamiltoniano (4.1) obtenemos la forma general para la matriz M :

$$M|_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -V_{11} & -V_{12} & 0 & 0 \\ -V_{21} & -V_{22} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Donde $V_{ij} \equiv \partial^2 V/\partial q_i \partial q_j$ valuado en la trayectoria.

Remplazando (4.15) en (4.10) obtendríamos la ecuación de evolución para la perturbación. Aparentemente el problema está casi resuelto ya que únicamente deberíamos de resolver dicha ecuación y analizar su comportamiento. Sin embargo hay que tener en mente que las derivadas del potencial deben de ser valuadas en

la trayectoria. Por lo que seguimos en las mismas, ya que para poder valuar las derivadas del potencial sobre la trayectoria, debemos primero tener la trayectoria, lo que implica haber resuelto las ecuaciones de movimiento previamente. Para darle la vuelta a este problema haremos una aproximación bastante fuerte. La aproximación consiste en olvidarnos de la dependencia temporal en la trayectoria donde se va a hacer la evaluación de las derivadas. Para ello, tomemos la trayectoria $\mathbf{x}(t)$ y remplazemos la variable temporal por las coordenadas explícitas (q_1, q_2, p_1, p_2) . Con ésto, tendremos que la trayectoria es función de las coordenadas únicamente (olvidandonos de la dependencia temporal). Por lo que, en las derivadas del potencial de la ecuación (4.15), nos olvidaremos de la dependencia temporal y haremos simplemente las derivadas parciales con respecto a las coordenadas sin tomar en cuenta el hecho de que hay que valuarlas sobre una trayectoria. Ello es obviamente una aproximación, pero nos permitirá encontrar un criterio relativamente sencillo para la aparición de movimientos caóticos en el sistema, empleando propiedades geométricas de la función de energía potencial. De este modo, dejaremos de escribir $M|_x$ y simplemente escribiremos M , donde ya tomamos la aproximación arriba mencionada. Ahora, observemos nuevamente la ecuación de evolución (4.10) de la perturbación, y apliquemos la aproximación:

$$\delta \dot{\mathbf{x}} = M \cdot \delta \mathbf{x}. \quad (4.16)$$

Con la ecuación (4.16) ya estamos listos para analizar la evolución de la perturbación, ya que no tenemos ninguna dependencia temporal y las derivadas del potencial son simples derivadas parciales con respecto a las variables dinámicas. Por lo tanto, las V_{ij} serán simplemente funciones que dependen únicamente de (q_1, q_2, p_1, p_2) , que serán calculadas a partir del potencial del sistema que estemos tratando. Este último punto es la cuestión medular del análisis, ya que no necesitaremos resolver las ecuaciones de movimiento para obtener la ecuación (4.16),

lo único que necesitamos es hacer unas simples derivadas del potencial.

Para finalizar con este análisis debemos de estudiar la ecuación (4.16) con algo de detalle. Como sabemos, el comportamiento cualitativo de la ecuación (4.16) será determinado por los valores propios de la matriz M . Si TODOS los valores propios de M son imaginarios entonces la perturbación va a evolucionar, en todas las direcciones dinámicas, cualitativamente como $\exp(i\omega t)$. Lo que nos indica que la separación entre las condiciones iniciales cercanas va a oscilar con el tiempo, y, lo más importante, es que no va a diverger exponencialmente. Por lo tanto, si todos los valores propios de M son imaginarios, no habrá divergencia exponencial en la separación de condiciones iniciales cercanas, por lo que el sistema será regular y no presentará movimientos caóticos.

Por otro lado, si AL MENOS UN valor propio de M es real, habrá al menos una dirección dinámica en la cual la perturbación δx evolucione cualitativamente como $\exp(\lambda t)$, donde λ es un número real. Esto nos indica que habrá una divergencia exponencial en la separación de condiciones iniciales cercanas. Por lo tanto, si algún valor propio de M es real, entonces tendremos divergencia exponencial de condiciones iniciales cercanas, es decir que estaremos en presencia de caos.

En la siguiente sección se dan las condiciones para las cuales los valores propios son imaginarios o reales.

4.3 Valores Propios de la Matriz de Evolución de la Perturbación

Para encontrar los valores propios de la matriz M , debemos de buscar los valores de λ que cumplan con la ecuación:

$$\det(M - \lambda \mathbf{1}) = 0, \quad (4.17)$$

o explícitamente:

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 & 1 \\ -V_{11} & -V_{12} & -\lambda & 0 \\ -V_{21} & -V_{22} & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (4.18)$$

Lo que nos da la ecuación característica para los valores propios

$$\lambda^4 + (V_{11} + V_{22})\lambda^2 + V_{11}V_{22} - (V_{12})^2 = 0, \quad (4.19)$$

cuyas soluciones son:

$$\lambda = \pm \sqrt{\frac{V_{11} + V_{22}}{2} \left(-1 \pm \sqrt{1 - 4 \frac{V_{11}V_{22} - (V_{12})^2}{(V_{11} + V_{22})^2}} \right)} \quad (4.20)$$

Como se puede esperar, encontrar las regiones para las cuales todos los valores propios de la ecuación (4.20) son imaginarios, es una tarea algo laboriosa, sin embargo el resultado final es muy corto y conciso como veremos a continuación.

Escribamos explícitamente los 4 valores propios:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= +\sqrt{\frac{\beta}{2}} \sqrt{-1 + \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}}}, \\ \lambda_2 &= +\sqrt{\frac{\beta}{2}} \sqrt{-1 - \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}}}, \\ \lambda_3 &= -\sqrt{\frac{\beta}{2}} \sqrt{-1 + \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}}}, \\ \lambda_4 &= -\sqrt{\frac{\beta}{2}} \sqrt{-1 - \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}}}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Donde se definieron las siguientes cantidades

$$\begin{aligned} \alpha &\equiv V_{11}V_{22} - V_{12}^2, \\ \beta &\equiv V_{11} + V_{22}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Como podemos observar de (4.21), $\lambda_3 = -\lambda_1$ y $\lambda_4 = -\lambda_2$, por lo que basta con analizar λ_1 y λ_2 . En lo que sigue supondremos que $\beta > 0$, por lo que necesitaremos comprobar, antes de aplicar el criterio de Toda-Bolotin que:

$$V_{11} + V_{22} > 0. \quad (4.23)$$

Usando (4.23) en (4.21) obtenemos que los dos valores propios independientes (λ_1 y λ_2) son de la forma:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &\propto \sqrt{-1 + \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}}}, \\ \lambda_2 &\propto \sqrt{-1 - \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}}}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Ahora analicemos cada uno de estos valores propios por separado.

- Para λ_1 :

$$(a) \quad 1 - \frac{4\alpha}{\beta^2} > 0 \quad \Leftrightarrow \quad \alpha < \frac{\beta^2}{4}.$$

En este caso tendremos que:

$$\sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}} \text{ es real,} \quad (4.25)$$

entonces, para que λ_1 sea imaginario, necesitamos que

$$\begin{aligned} -1 + \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}} &< 0 \\ \Rightarrow 1 - \frac{4\alpha}{\beta^2} &< 1 \\ \Rightarrow \frac{4\alpha}{\beta^2} &> 0 \\ \Rightarrow \alpha &> 0. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Por lo tanto, en este caso (a), basta con pedir que $\alpha > 0$ y con eso nos aseguramos de que λ_1 sea imaginario. Ahora veamos el otro caso.

$$(b) \quad 1 - \frac{4\alpha}{\beta^2} \leq 0 \Leftrightarrow \alpha \leq \frac{\beta^2}{4}:$$

Para este caso tendremos que:

$$\sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}} \text{ es imaginario,} \quad (4.27)$$

entonces, para el caso (b), λ_1 será siempre imaginario.

Juntando ambos casos (a) y (b), vemos que para que λ_1 sea imaginario se necesita que $\alpha > 0$. Por lo que

$$\alpha > 0 \Rightarrow \lambda_1 \text{ es imaginario.} \quad (4.28)$$

Ahora analicemos el otro valor propio independiente.

• Para λ_2 :

$$(a) \quad 1 - \frac{4\alpha}{\beta^2} \geq 0 \Leftrightarrow \alpha \leq \frac{\beta^2}{4}:$$

En este caso tendremos que:

$$\sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}} \text{ es real,} \quad (4.29)$$

lo que implica que

$$-1 - \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}} < 0. \quad (4.30)$$

Por lo que, en este caso (a), λ_2 será imaginario siempre.

$$(b) \quad 1 - \frac{4\alpha}{\beta^2} < 0 \Leftrightarrow \alpha > \frac{\beta^2}{4}:$$

Para este caso tendremos que:

$$\sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2}} \text{ es imaginario,} \quad (4.31)$$

por lo que, en este caso (b), λ_2 será siempre imaginario.

Vemos entonces que λ_2 es siempre imaginario, siempre y cuando $\beta > 0$. Recopilando todos los casos analizados, se puede concluir que si queremos que TODOS los valores propios sean imaginarios debemos de pedir que $\alpha > 0$ y verificar que $\beta > 0$. Si α toma un valor negativo, entonces λ_1 y λ_3 serán reales. Para el caso límite en el que $\alpha = 0$ dos de los valores propios son cero y los otros dos son imaginarios. Resumiendo todo esto, podemos afirmar que

si $V_{11}V_{22} - V_{12}^2 > 0 \Rightarrow$ TODOS los valores propios son imaginarios,

si $V_{11}V_{22} - V_{12}^2 \leq 0 \Rightarrow$ AL MENOS un valor propio es real.

Por lo tanto, si $V_{11}V_{22} - V_{12}^2 > 0$ no existirá divergencia exponencial para condiciones iniciales cercanas, mientras que si $V_{11}V_{22} - V_{12}^2 < 0$ entonces sí habrá divergencia exponencial.

Por otro lado, veamos la definición de *curvatura gaussiana* de una superficie bidimensional. Tomemos como superficie bidimensional al potencial $V(q_1, q_2)$, entonces su curvatura gaussiana, K , se define como:

$$K \equiv \frac{V_{11}V_{22} - V_{12}^2}{(1 + V_{11}^2 + V_{22}^2)^2}. \quad (4.32)$$

Como podemos constatar, K tiene el mismo signo que $\alpha \equiv V_{11}V_{22} - V_{12}^2$. Por lo que basta con analizar el signo de la curvatura gaussiana para saber si el sistema tendrá un comportamiento regular o caótico. Cabe señalar que el haber introducido la curvatura gaussiana es algo artificial y que el hecho que $V_{11}V_{22} - V_{12}^2$ tenga el mismo signo que K es una casualidad. Aunque, el haber introducido la curvatura gaussiana nos ayudará a visualizar geoméricamente el problema, ya que podemos razonar por analogía con el movimiento de una partícula sobre una superficie con

la forma del potencial. De esta manera, la imagen que tendremos de nuestro problema será la de una partícula que se mueve sobre la superficie generada por el potencial.

Entonces, si la trayectoria de una partícula, sometida al potencial $V(q_1, q_2)$, vive completamente en la región de curvatura gaussiana positiva ($K > 0$), todos los valores propios de M serán imaginarios y no existirá caos. Si por el contrario, la trayectoria es tal que la partícula entra en una región de curvatura gaussiana negativa del potencial ($K < 0$), entonces al menos un valor propio de M será real lo cual indica la existencia de caos. Ahora veamos qué relación tiene lo que acabamos de ver con la energía crítica de transición orden-caos.

Generalmente, los potenciales intramoleculares tienen una región de curvatura gaussiana positiva a bajas energías y a altas energías el potencial tiene curvatura gaussiana negativa. Esto es lo que sucede justamente para los potenciales del péndulo completo y del truncado. Entonces, para dar una estimación de la energía crítica de transición orden-caos debemos de buscar la energía mínima que necesita la partícula para alcanzar una región de curvatura gaussiana negativa. Llamemos E_c a esa energía. Si la partícula tiene una energía menor que E_c entonces no podrá alcanzar una región con $K < 0$, por lo que será una órbita regular. En cambio, si la partícula tiene una energía mayor que E_c , entonces habrá alguna condición inicial que haga que la partícula llegue a una zona con $K < 0$, lo que dará lugar a un comportamiento caótico. Por lo tanto, la estimación de la energía crítica de transición orden-caos será simplemente la energía mínima necesaria para alcanzar una zona con curvatura gaussiana negativa.

Con este criterio podemos dar una estimación de E_c con solo examinar el potencial al cual está sujeto la partícula. Para ello, basta con calcular la energía

mínima que tenga $K = 0$ (ya que justo arriba de ella tendremos una zona con $K < 0$). Por lo tanto, el problema de encontrar E_c se reduce a un problema geométrico, donde se busca el mínimo de una función (la energía) dentro de una constricción ($K = 0$), sin que se nos olvide verificar la condición $V_{11} + V_{22} > 0$. En las dos siguientes secciones se hace lo anterior para los potenciales completo y truncado del péndulo extensible.

4.4 Energía de Transición Orden-Caos en el Péndulo Completo

Verifiquemos primero que $V_{11} + V_{22} > 0$ en la región con $K = 0$. Haciendo las derivadas del potencial completo se puede llegar a que:

$$V_{11} + V_{22} = \frac{f - 1}{\sqrt{q_1^2 + (1 - q_2)^2}} + 2. \quad (4.33)$$

Por otro lado, pedir que $K = 0$ se reduce a pedir que:

$$q_1^2 + (1 - q_2)^2 = (1 - f)^2. \quad (4.34)$$

Combinando las ecuaciones (4.33) y (4.34) se llega a que dentro de la región con $K = 0$ se tiene siempre que:

$$V_{11} + V_{22} = 1 > 0, \quad (4.35)$$

por lo que la condición $V_{11} + V_{22} > 0$ se cumple bien. Veamos ahora la forma del potencial cuando $K = 0$. Usando la ecuación (4.34) se obtiene que:

$$V_{K=0} = f q_2. \quad (4.36)$$

Ahora bien, de la ecuación (4.34) se puede ver que el valor mínimo que puede tomar q_2 manteniendo $K = 0$ es $1 - (1 - f) = f$, ya que la ecuación (4.34) representa un

círculo de radio $1 - f$ centrado en el punto $(q_1, q_2) = (0, 1)$. Por lo que la ecuación (4.36) alcanzará su mínimo cuando $q_2 = f$. Lo que nos da, metiendo este valor en la ecuación (4.36), el valor de E_c para el potencial completo:

$$E_c = f^2 \quad (4.37)$$

Entonces, el valor de la energía crítica de transición orden-caos para el péndulo completo es $E_c = f^2$.

4.5 Energía de Transición Orden-Caos en el Péndulo Truncado

Procedamos de la misma manera que para el potencial completo. Tomando ahora el potencial truncado y calculando las derivadas correspondientes se obtiene:

$$V_{11} + V_{22} = f + 1 + (1 - f)q_2. \quad (4.38)$$

Y la condición $K = 0$ nos lleva a que:

$$q_2 = \frac{f}{1 - f} - (1 - f)q_1. \quad (4.39)$$

De esta ecuación podemos ver que el valor máximo de q_2 se da cuando $q_1 = 0$, por lo tanto el q_2 máximo vale $f/(1 - f)$, *i.e.*

$$q_2 \leq \frac{f}{1 - f}. \quad (4.40)$$

Recordemos que en el capítulo anterior dijimos que el estudio se iba a restringir a los casos en que $0 \leq f \leq 1$, *i.e.*

$$f - 1 \leq 0. \quad (4.41)$$

Multiplicando la ecuación (4.40) por $f - 1$ (que es negativo según la ecuación (4.41)) obtenemos:

$$(f - 1)q_2 \geq \frac{f}{1 - f}(1 - f) = -f, \quad (4.42)$$

sumando $f + 1$ de ambos lados y simplificando se llega finalmente a que:

$$f + 1 + (1 - f)q_2 \geq 1. \quad (4.43)$$

Si comparamos esta última ecuación con la ecuación (4.38) llegamos a que se cumple la ecuación (4.23): $V_{11} + V_{22} > 0$. Por lo que podemos aplicar el criterio de la curvatura gaussiana.

Busquemos entonces la energía mínima que tenga $K = 0$. Como dijimos, la condición para que $K = 0$ es equivalente a la ecuación (4.39). Si metemos esta condición en el potencial truncado se llega a que:

$$V_{K=0} = (1 - f)^2 q_1^4 - f q_1^2 + \frac{f^2}{2(1 - f)^2} + \frac{f^2}{2}. \quad (4.44)$$

Los puntos críticos de $V_{K=0}$ se dan cuando:

$$q_1 = 0 \quad \text{y cuando} \quad q_1^2 = \frac{f}{2(1 - f)^2}. \quad (4.45)$$

Se puede verificar que el primero es un máximo y que el segundo es un mínimo, por lo que el valor de q_1 que nos sirve para encontrar el mínimo de la energía es el segundo. Metiendo ese valor en el potencial truncado obtenemos el valor de E_c :

$$E_c = \frac{f^2}{4(1 - f)^2} + \frac{f^2}{2}. \quad (4.46)$$

Que en términos de las energías máximas y mínimas del potencial truncado (que definimos en el capítulo anterior) nos queda como

$$E_c = \frac{E_{max} - E_{min}}{2} + E_{min}. \quad (4.47)$$

Por lo tanto, el valor de la energía crítica de transición orden-chaos para el péndulo truncado es finalmente

$$E_c = \frac{E_{max} + E_{min}}{2}. \quad (4.48)$$

En esta sección calculamos entonces las estimaciones de las energías de transición orden-caos para el péndulo truncado y el completo. Cabe recordar que el criterio que usamos para estas energías es aproximado debido a que eliminamos la dependencia explícita del tiempo en la matriz de evolución para la perturbación. En el siguiente capítulo se muestran los resultados obtenidos experimentalmente (por medio de una computadora) para el péndulo truncado, que serán comparados con la estimación de la energía crítica de transición orden-caos obtenida con el criterio de Toda-Bolotin (ecuación (4.48)).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

5.0 Introducción

En este capítulo presentaremos los resultados obtenidos. Daremos una idea de los métodos de integración utilizados así como de los instrumentos computacionales que se requirieron. Veremos las secciones de Poincaré, los espectros de potencias, la función de autocorrelación, los exponentes de Liapunov, espacios fase, espacios físicos, etc. Como es de esperarse, en un trabajo de esta naturaleza en donde todo el análisis del sistema se realizó por métodos de integración numérica, este capítulo de resultados presenta un gran número de gráficas. Estas gráficas serán nuestros resultados experimentales que compararemos con la predicción teórica para la energía de transición orden-chaos.

5.1 Integración Numérica

Como ya se mencionó, las ecuaciones de movimiento para los dos sistemas no son integrables analíticamente, por lo que se tuvo que recurrir a la integración numérica. Se trataron varios métodos de integración en computadoras distintas usando diversos lenguajes de programación.

Primeramente se desarrollo un programa, en lenguaje de programación C (Kernigan y Ritchie 1985) en una computadora IBM PC compatible (procesador 386 con coprocesador matemático), para simular el movimiento en el espacio físico del péndulo (para ambos potenciales). En este programa se usó en un principio el método numérico de integración de Euler (Gould y Tobochnik 1988) para una primera visualización del problema. El método de Euler es el método de integración numérica más sencillo que existe, pero por lo mismo es el menos preciso (en la mayoría de los casos). Sin embargo, la sencillez del método de Euler nos permite visualizar sin mucho esfuerzo (con un algoritmo corto) el sistema que estamos tratando. Además, este método, por tener un algoritmo corto, nos permite integrar con bastante rapidez. Este método funcionó muy bien a bajas energías, pero a altas energías se tuvieron problemas con la conservación de la energía, por lo que se implementó el mismo programa pero con el método numérico de integración de Verlet o leap frog (Gould y Tobochnik 1988). El método de Verlet usa un algoritmo que es ligeramente más largo que el de Euler, pero la precisión del método si se mejora considerablemente en la mayoría de los casos, en particular para nuestro sistema.

Una vez familiarizados con el sistema y con el tipo de trayectorias que generaba, se desarrolló otro programa con las mismas características que el anterior, para visualizar las secciones de Poincaré. Con este programa nos dimos cuenta de que en efecto el sistema del péndulo extensible presenta un comportamiento caótico para ciertos valores de sus parámetros y de su energía, aunque todos estos resultados fueron más tarde corroborados por nuevos programas con otras rutinas de integración mucho más precisas. La ventaja de este programa es que se visualiza directamente cómo se va creando la sección de Poincaré, en cambio, con los programas que se realizaron posteriormente, la visualización inmediata de las

secciones de Poincaré es imposible como veremos más adelante.

Para los cálculos precisos del sistema se usó una computadora MICRO VAX 3900 del Instituto de Física de la UNAM. Los programas realizados en la MICRO VAX fueron escritos en lenguaje de programación FORTRAN (Lignelet 1985) y se usó el programa MERSON de las bibliotecas del Cern Library. El programa MERSON utiliza el método de Runge-Kutta de 4^{to} orden (Press W.H. *et al.*, 1988) para la integración numérica. El método de Runge-Kutta de 4^{to} orden es mucho más preciso que el de Euler o el de Verlet, aunque el algoritmo es más largo y por lo tanto más lento. Al usar el método de Runge-Kutta estamos sacrificando tiempo pero estamos ganando precisión, y como se comentó en el capítulo 2, la precisión es un factor crucial en la detección del caos. Esto último es debido a que nos sería difícil detectar si los resultados parecen caóticos porque en realidad lo son o porque cometimos mucho error en la integración numérica. A continuación describiremos los programas que se realizaron en la MICRO VAX. Por otro lado, el programa de MERSON usa un algoritmo de paso de integración variable, *i.e.* que usa un paso de integración pequeño en donde la integración así lo requiera y usa un paso de integración más grande cuando no se afecte a la precisión impuesta. Esta autorregulación del paso de integración acelera mucho el algoritmo de integración sin afectar la precisión de los resultados.

Para realizar las secciones de Poincaré que se muestran en este trabajo se diseñó un programa en la MICRO VAX, en lenguaje de programación FORTRAN, con rutinas de MERSON que integran numericamente con el método de Runge-Kutta. A este programa se le dan una serie de condiciones iniciales y conforme va integrando numericamente guarda las coordenadas de los puntos de las secciones de Poincaré en un archivo de datos. Finalmente, este archivo de datos es trasladado al DEC SYSTEM 3100 del Instituto de Física de la UNAM para poder ser graficado

en pantalla y mandado a imprimir a una impresora laser por medio del programa GNUPLOT. Como podemos notar, para poder graficar en la pantalla una sección de Poincaré, se necesitan varios pasos, por eso es que se realizó el programa que grafica directamente las secciones de Poincaré en un PC. De esta manera se podía verificar cuales condiciones iniciales convenian para la sección de Poincaré antes de poner a trabajar a la MICRO VAX. La ventaja de todo este procedimiento es que la integración se realiza en una computadora más rápida que una PC, con un método de integración mucho más preciso (y sobre todo que ya ha sido probado con anterioridad) y la impresión en impresora laser tiene mucha más definición. Esto último se debe a que el programa de graficación GNUPLOT del DEC SYSTEM no hace una impresión directa de la pantalla de alta resolución que tiene una definición de 640×380 sino que manda las cordenadas de los puntos a la impresora laser que tiene una definición de 300DPI (300 dots per inch, *i.e.* 300 puntos por pulgada), lo cual supera ampliamente la definición de cualquier pantalla gráfica de una PC.

Para cacular los exponentes de Liapunov se utilizaron dos programas distintos. El primer programa que se desarrollo, con las mismas características que el anterior, calcula los 4 exponentes de Liapunov, uno para cada una de las 4 direcciones en el espacio fase, del sistema usando la ecuación (2.15). Se encontró que 2 de los exponentes eran practicamente cero (comparados con los otros 2) y que los dos restantes, en el caso de órbitas caóticas, eran distintos de cero pero lo más importante que uno era el negativo del otro. Con esto verificamos que nuestros cálculos eran aceptables ya que se verificaron dos de las propiedades de los exponentes de Liapunov en sistemas hamiltonianos: siempre existen dos exponentes iguales a cero y los exponentes de Liapunov aparecen por pares. Posteriormente se usó el programa de TRAJPOL de Martin Zirnbauer en la MICRO VAX. Este programa sólo cacula el exponente de Liapunov más grande por medio de la ecuación (2.14)

por lo que su algoritmo es mucho más rápido que el anterior. Afortunadamente, los dos programas arrojaron resultados similares por lo cual nos conformamos en utilizar sistemáticamente el programa de TRAJPOL para calcular el exponente de Liapunov y así ahorrar tiempo de procesador.

Para el espectro de potencias y la función de autocorrelación se instrumentó un programa en la MICRO VAX que usa la TDF (transformada discreta de Fourier) con el programa FFTRC de las rutinas de IMSL de la MICRO VAX. Y finalmente se desarrollaron programas varios para obtener las secciones de Poincaré del sistema de Henon y Heiles, para ver la evolución de una pequeña región de condiciones iniciales en el espacio físico y en el espacio fase, y para visualizar trayectorias en el espacio físico y en el espacio fase.

De ser necesario daremos, en cada sección de este capítulo, información más detallada sobre cada uno de los programas que se realizaron para obtener los resultados aquí expuestos.

5.2 Primeras Evidencias

En esta sección veremos las primeras evidencias que muestran que los dos sistemas, péndulo truncado y péndulo completo, presentan un comportamiento caótico a altas energías. Para ello se muestran trayectorias en el espacio físico y en el espacio fase, la evolución de un pequeño volumen de condiciones iniciales, los espectros de potencias y las funciones de autocorrelación. Todo esto para trayectorias regulares (bajas energías) y para trayectorias caóticas (altas energías).

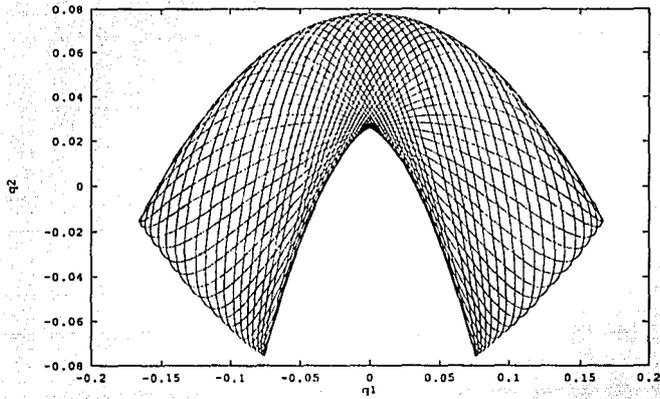


FIGURA 5.1.a. Trayectoria regular del péndulo truncado.

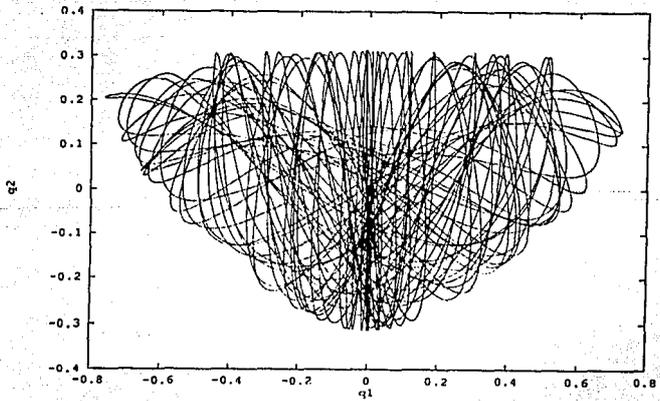


FIGURA 5.1.b. Trayectoria caótica del péndulo truncado.

5.2.1 Trayectorias en el Espacio Físico y en el Espacio Fase

Como se ha dicho con anterioridad, el caos proviene de la alta sensibilidad a las condiciones iniciales. ¿Pero si observásemos directamente una trayectoria particular del sistema podríamos decir si es caótica o no a simple vista? La respuesta a esta pregunta es que necesitamos más información que una sola trayectoria para saber si ésta última es caótica o no. Si tan sólo tenemos una trayectoria del sistema es imposible asegurar si existe caos o no, pero si tenemos varias trayectorias podemos hacer algunas comparaciones. En la figura (5.1), página anterior, se muestran dos trayectorias físicas (q_1, q_2) del péndulo truncado. La figura (5.1.a) representa la trayectoria en el espacio físico del péndulo truncado con $f = 0.25$ a baja energía, $E = 0.035$, y la figura (5.1.b) es la trayectoria del mismo sistema, $f = 0.25$, a alta energía, $E = 0.08$. Podemos observar una gran diferencia entre ambas trayectorias, esto se debe a que la primera es regular y la segunda es caótica. A simple vista, la noción de caos está representada en estas trayectorias: la trayectoria regular tiene una tendencia bien determinada, parece que sigue cierto patrón de comportamiento, por el contrario, la trayectoria caótica no tiene una dinámica regular, no sigue ningún patrón de movimiento.

Pensemos que es lo que pasaría si hiciésemos una pequeña modificación en las condiciones iniciales en ambas trayectorias. Para la trayectoria regular, una perturbación en las condiciones iniciales daría lugar a una trayectoria muy parecida ya que el movimiento sigue un cierto patrón. Pero una perturbación en la trayectoria caótica daría lugar a una trayectoria que no se podría predecir a partir del comportamiento de la original. Este fenómeno sería el equivalente a tratar de adivinar el número que va a caer en un dado: si el dado está cargado tenemos una gran oportunidad de adivinar el número, pero si no lo está, sería imposible decir con certeza cual será.

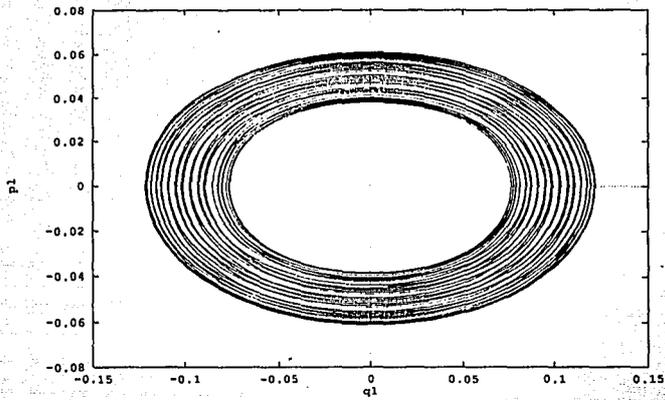


FIGURA 5.2.a. Trayectoria regular en el espacio fase del péndulo truncado.

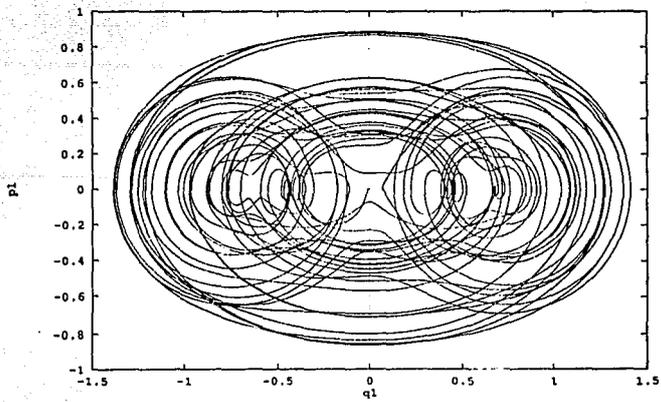


FIGURA 5.2.b. Trayectoria caótica en el espacio fase del péndulo truncado.

También podemos observar el mismo efecto de regularidad en el espacio fase (q_1, p_1) , figura (5.2). En la figura (5.2.a) se muestra el espacio fase (q_1, p_1) de la trayectoria de la figura (5.1.a) y se observa nuevamente cierta regularidad. Por el contrario, en la figura (5.2.b), espacio fase (q_1, p_1) de la trayectoria de la figura (5.1.b), podemos observar que no existe un patrón determinado. Por lo tanto, se pueden extraer las mismas conclusiones que para la figura (5.1). Claro está que las figuras (5.1) y (5.2) no son suficientes para afirmar que el péndulo truncado presenta caos, pero nos dan cierta evidencia de que así sucede.

5.2.2 Evolución de Condiciones Iniciales Cercanas

Como se ha venido mencionando, la propiedad fundamental de un sistema caótico es la alta sensibilidad a las condiciones iniciales. Por esta razón se ideó un programa que ayuda a visualizar el efecto de esta alta sensibilidad a las condiciones iniciales. Este programa toma una serie de condiciones iniciales cercanas, al tiempo t_0 , que forman un rectángulo en el espacio fase (q_1, p_1) , las deja evolucionar hasta un cierto tiempo t_1 y son graficadas, luego las deja evolucionar hasta otro tiempo t_2 ($t_2 > t_1$) y son graficadas, y así sucesivamente. Lo que se obtiene finalmente es la evolución de una región de condiciones iniciales cercanas a intervalos de tiempo.

Veamos primero lo que sucede para el péndulo truncado a baja energía, $E = 0.035$. La figura (5.3) presenta la evolución de un pequeño rectángulo de condiciones iniciales ($0.01 < q_1 < 0.05$ y $0.01 < p_1 < 0.05$) en el espacio fase (q_1, p_1) . Los tiempos de muestreo son $t_0 = 0$, $t_1 = 2.5$, $t_2 = 5$, $t_3 = 10$, $t_4 = 15$ y $t_5 = 20$ (en segundos del sistema). Podemos observar que el rectángulo de condiciones iniciales se deformó muy poco con el tiempo. Es decir que condiciones iniciales cercanas evolucionaron de la misma manera, sin separarse mucho. Esto

comprueba que en este caso, $E = 0.035$, para el rectángulo de condiciones iniciales que se escogió, no existe divergencia exponencial entre condiciones iniciales cercanas.

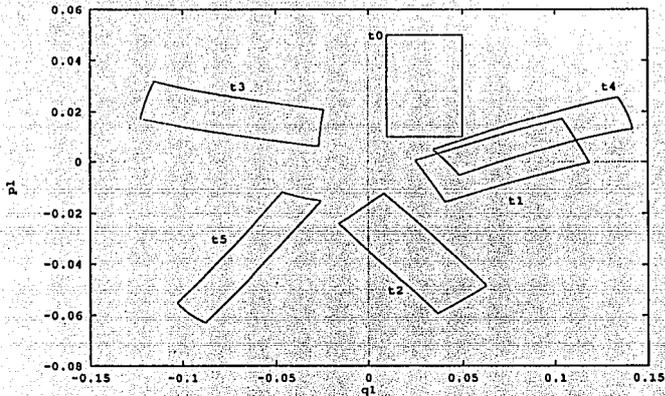


FIGURA 5.3. Evolución de condiciones iniciales cercanas del péndulo truncado en una región ordenada.

Ahora tomemos el mismo sistema, péndulo truncado con $f = 0.25$, y la misma región de condiciones iniciales ($0.01 < q_1 < 0.05$ y $0.01 < p_1 < 0.05$) pero para una energía alta, $E = 0.08$, figura (5.4). Los tiempos son los mismos que la figura anterior: $t_0 = 0$, $t_1 = 2.5$, $t_2 = 5$, $t_3 = 10$, $t_4 = 15$ y $t_5 = 20$. Vemos como la evolución del rectángulo de condiciones iniciales es completamente distinta a la anterior, en este caso, la misma pequeña porción de condiciones iniciales se deforma notablemente y pierde su forma, en el mismo tiempo. Después de las primeras iteraciones se puede observar claramente que existe contracción en una dirección y expansión en otra dirección. Esto concuerda con el teorema de Liouville

sobre conservación de flujo en sistemas hamiltonianos que dice que el volumen del espacio fase se conservarse a lo largo de la evolución.

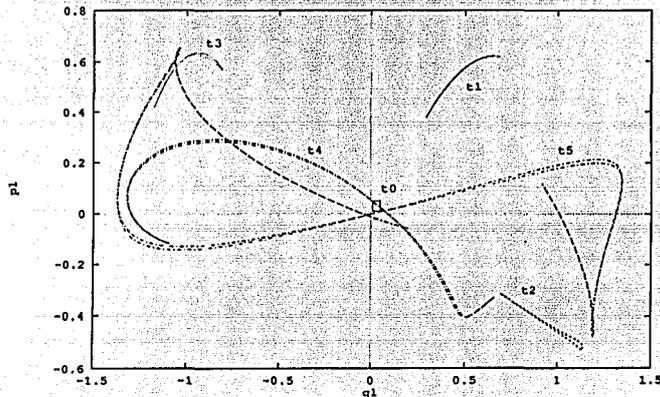


FIGURA 5.4. Evolución de condiciones iniciales cercanas del péndulo truncado en una región caótica.

Es claro entonces que en la figura (5.4) existe una divergencia rápida entre condiciones iniciales cercanas en alguna de las direcciones del espacio fase. Al tiempo t_0 tenemos una región muy pequeña de condiciones iniciales que evoluciona, hasta el tiempo t_5 , en una región, con la misma área que la anterior, que se esparce por todo el espacio fase. Esto quiere decir que esas condiciones iniciales cercanas evolucionan de tal manera que después de cierto tiempo están lo suficientemente alejadas como para cubrir una buena parte del espacio fase. Por lo que se concluye que en este caso, condiciones iniciales cercanas, pueden estar, después de un tiempo relativamente corto, bastante alejadas y por lo tanto dar lugar a trayectorias completamente distintas (cuando la energía es alta).

5.2.3 Espectro de Potencias y Función de Autocorrelación

Como se vió en la sección 2.5, el espectro de potencias y la función de autocorrelación pueden ser unos buenos indicadores sobre la existencia de caos en sistemas hamiltonianos. Apliquemos lo visto para analizar las figuras (5.5) y (5.6) donde se presentan los espectros de potencias de dos trayectorias físicas. La figura (5.5) representa el espectro de potencias de una trayectoria del péndulo truncado para $f = 0.25$ con una energía baja, $E = 0.035$ y la figura (5.6) para una energía alta, $E = 0.08$. Podemos ver rápidamente que la figura (5.5) corresponde al espectro de potencias de una órbita cuasiperiódica en tanto que la figura (5.6) corresponde al espectro de potencias de una trayectoria caótica.

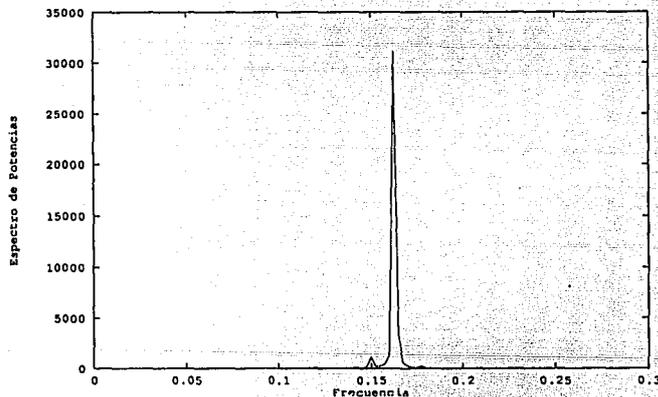


FIGURA 5.5. Espectro de potencias de una trayectoria cuasiperiódica del péndulo truncado.

El espectro de potencias de la trayectoria cuasiperiódica de la figura (5.5) tiene un pico muy pronunciado en $\omega_0 = 0.1625$ y dos picos subyacentes ($\omega = 0.15$

y $\omega = 0.1775$). Esto quiere decir que las variables dinámicas de esta trayectoria se repiten ω_0 veces por segundo aproximadamente, i.e. que se repiten cada $1/\omega_0 \simeq 6.15$ segundos del sistemas. Esto implica que existe cierta regularidad en el sistema, ya que existe un patrón repetitivo en las variables dinámicas. Por lo tanto podemos concluir que esta trayectoria no es caótica.

El espectro de potencias de la trayectoria de la figura (5.6), al contrario que el de la anterior, no tiene sólo un pico dominante. Podemos ver que este espectro de potencias está constituido por una serie de picos que van desde $\omega = 0.0175$ hasta $\omega = 0.2675$. Por lo tanto, podemos decir que las variables dinámicas de esta trayectoria no se repiten con regularidad. Es decir que no existe un patrón de evolución de las variables dinámicas para esta trayectoria. Por lo que concluimos que estamos frente a una órbita caótica.

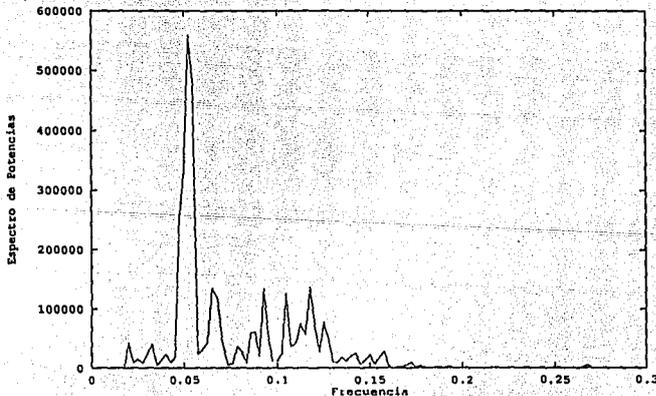


FIGURA 5.6. Espectro de potencias de una órbita caótica del péndulo truncado.

Veamos las correspondientes funciones de autocorrelación para los dos tipos de órbitas anteriores. En las figuras (5.7) y (5.8) se presentan las funciones de autocorrelación de las trayectorias cuyos espectros de potencias corresponden a las figuras (5.5) y (5.6) respectivamente.

Vemos como la función de autocorrelación de la primera trayectoria, a bajas energías, no decrece nunca hasta cero, sino que oscila alrededor de un cierto valor. Esto se debe a que estamos tratando con una órbita cuasiperiódica en donde, como su nombre lo indica, las variables se repiten con cierta regularidad. La función de autocorrelación parte de un máximo y disminuye ligeramente porque las variables no se repiten a intervalos de tiempo completamente idénticos, sin embargo vuelve a crecer ya que después de cierto tiempo regresamos muy cerca del estado inicial, y este proceso se repite indefinidamente.

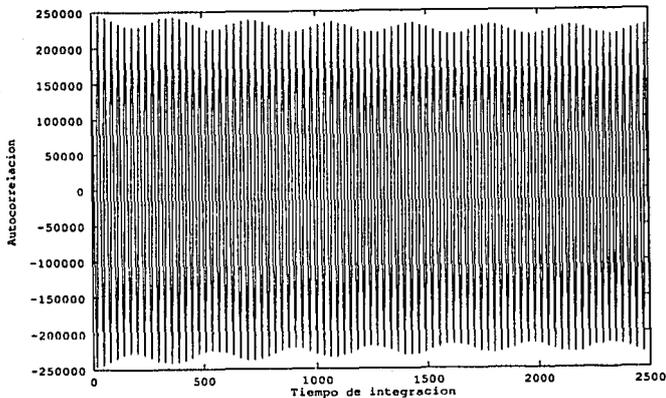


FIGURA 5.7. Función de autocorrelación de una órbita cuasiperiódica del péndulo truncado.

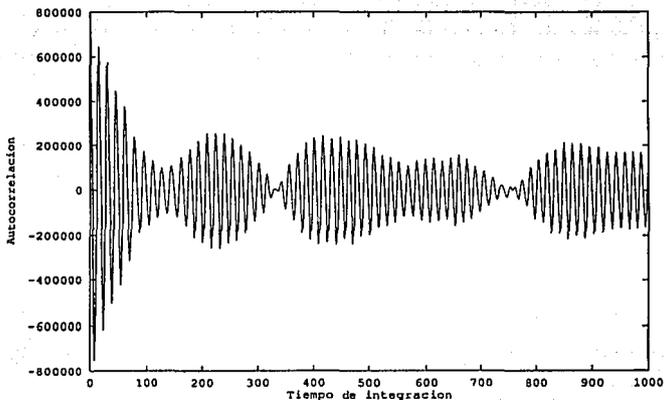


FIGURA 5.8. Función de autocorrelación de una órbita caótica del péndulo truncado.

Para la función de autocorrelación de la segunda trayectoria, a altas energías, pasa algo completamente distinto. La función de autocorrelación parte de un máximo y disminuye rápidamente hasta llegar muy cerca de cero a los 150 segundos donde crece un poco y decae completamente a cero a los 350 segundos. En este instante el sistema ha perdido por completo la información que tenía en un principio, *i.e.* sería imposible saber de donde vino la partícula o mejor dicho cuales fueron las condiciones iniciales del sistema. Notese que las escalas de tiempo de esta figura son menores que las escalas de tiempo utilizadas en la figura anterior, lo que indica que el proceso de pérdida de información es rápido. Finalmente la función de autocorrelación de la segunda trayectoria vuelve a crecer un poco y decae a cero y así sucesivamente. Esto se debe a que el sistema, después de cierto tiempo, regresa muy cerca del estado que tenía inicialmente. Esta propiedad

de los sistemas caóticos es muy interesante; una órbita caótica es capaz de llenar densamente una región del espacio fase (región caótica) sin llegar nunca a cerrarse. Esto quiere decir que para cualquier condición inicial que demos al sistema, en la región caótica, siempre habrá un tiempo finito para el cual la órbita regrese, tan cerca como se quiera, de la condición inicial original sin nunca llegar a cerrarse, teorema de Poincaré-Zermelo.

5.3 Secciones de Poincaré

Como se vio en la sección 2.2, una trayectoria es regular si los puntos de la sección de Poincaré (corte bidimensional del espacio fase) forman una curva unidimensional. Si por el contrario estos puntos llenan una región bidimensional en la sección de Poincaré entonces estamos frente a una trayectoria caótica.

En el programa que se escribió para obtener las secciones de Poincaré se escogió el plano (q_1, p_1) como plano de corte. Recordemos que nuestro sistema es 4-dimensional pero que al pedir la conservación de la energía nos quedamos con 3 coordenadas libres. Para hacer entonces un corte bidimensional necesitamos fijar una variable, esto se hizo pidiendo que $q_2 = 0$, de esta manera, las secciones de Poincaré quedaron en el plano (q_1, p_1) con $q_2 = 0$ y se pidió que $p_2 > 0$.

Para obtener una sección de Poincaré completa se tuvo que proceder de la siguiente manera. Primero se escogieron una serie de condiciones iniciales usando el programa que se realizó en la PC. De esta manera nos aseguramos de que esas condiciones iniciales, que podían ser de 10 a 18, llenaban uniformemente la sección de Poincaré sin dejar mucho espacio vacío. Esto último es bastante importante, ya que si no escogemos bien la serie de condiciones iniciales podemos pasar por

alto algunas regiones que pueden ser interesantes, i.e. que presenten caos. Posteriormente, con esta serie de condiciones iniciales se alimenta el programa de la MICRO VAX. Este programa toma cada condición inicial y a partir de ella comienza a integrar. Continuamente, en cada paso de integración, se verifica si q_2 cambia de signo y si $p_2 > 0$, si es así, estamos seguros de que q_2 fue cero en algún momento previo. Si guardásemos las coordenadas (q_1, p_1) en ese paso de integración cometeríamos un cierto error ya que en ese instante q_2 no es exactamente cero. Para solucionar este problema, cada vez que q_2 cambia de signo se regresa un paso de integración (antes de que q_2 cambie de signo), se reduce el paso de integración en un factor de 10 y se continúa integrando hasta que q_2 cambie nuevamente de signo, entonces se aplica el mismo procedimiento. Este procedimiento se aplicó 2 o 3 veces en las gráficas obtenidas, de esa manera nos aseguramos de que q_2 estaba muy próximo a cero en el momento que se guardó el punto (q_1, p_1) en un archivo de datos. Esto se hizo para cada una de las condiciones iniciales de la serie.

5.3.1 Secciones de Poincaré del Péndulo Completo

Antes de analizar las secciones de Poincaré del péndulo truncado veamos una serie de secciones de Poincaré del péndulo completo. Con esto analizaremos el efecto que tiene sobre el sistema el haber hecho un desarrollo en serie de Taylor del potencial. Se espera de antemano que la dinámica del péndulo completo y del péndulo truncado sea muy parecida a bajas energías ya que justamente se hizo el desarrollo alrededor de la posición de equilibrio (E_{min}).

En la figura (5.9) se presenta una serie de secciones de Poincaré para el péndulo completo con $f = 0.25$. Podemos saber mucho acerca de la dinámica del péndulo completo con sólo observar esta serie de secciones. Vemos como para una energía

baja, $E = 0.035$, todas las trayectorias son cuasiperiódicas. Cabe mencionar que las trayectorias que pasan por el primer cuadrante también pasan por el tercer cuadrante, lo mismo sucede para las trayectorias del segundo cuadrante que son las mismas que las del cuarto cuadrante. Esto se debe a la simetría del sistema: el péndulo oscila de un lado para el otro, se mueve de izquierda a derecha como de derecha a izquierda. Cuando el péndulo cruza el eje q_1 ($q_2 = 0$) para $q_1 < 0$ de izquierda a derecha ($p_1 > 0$) y de abajo hacia arriba ($p_2 > 0$) obtenemos un punto en el segundo cuadrante de la sección, y cuando regresa cruza el eje q_1 ($q_2 = 0$) para $q_1 > 0$ de derecha a izquierda ($p_1 < 0$) y de abajo hacia arriba ($p_2 > 0$) obtenemos un punto en el cuarto cuadrante. Esta simetría nos reduce el trabajo: nos basta analizar el primer y segundo cuadrante de la sección ya que los dos cuadrantes restantes, tercer y cuarto, son sus simétricos.

Sin embargo, como se puede observar, la simetría se rompe a altas energías ($E \geq 0.4375$). Para $E = 0.4375$ podemos observar una diferencia entre las trayectorias del primer y tercer cuadrante, esto se debe a que la simetría se rompió. Lo que sucede es que a altas energías el péndulo ya no solo oscila alrededor de su posición de equilibrio, sino que también puede llegar a girar o pasar por arriba del punto donde se sujeta el resorte. Esto provoca que una trayectoria a altas energías gire solamente hacia un lado (el contrario a las manecillas del reloj por ejemplo) y que no pueda hacerlo hacia el otro lado, lo que tiene como resultado que su sección de Poincaré pierda la simetría que mencionamos antes.

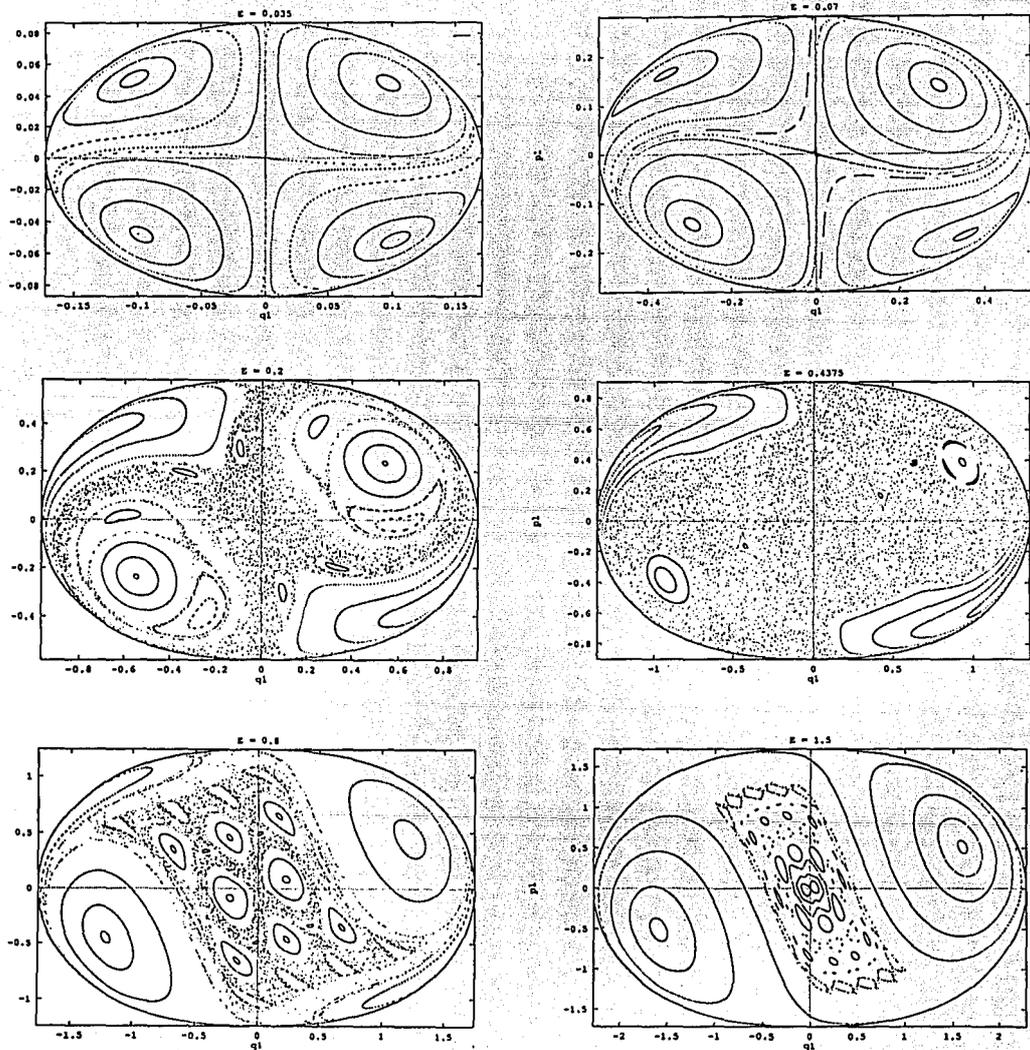


FIGURA 5.9. Secciones de Poincaré del péndulo completo para $f = 0.25$.

Una vez teniendo clara la simetría podemos concluir que para $E = 0.035$ todas las trayectorias son cuasiperiódicas y que existen dos (y no cuatro) órbitas perfectamente periódicas. Estas trayectorias periódicas se localizan justo en el centro de los círculos deformados del primer y segundo cuadrante. Gracias a que dentro de un toro existe otro toro más pequeño que no corta al anterior, y dentro de ese nuevo toro existe uno más pequeño y así indefinidamente. Entonces existirá un toro que sea infinitamente delgado que esté dentro de todos los toros más grandes que él. Este último toro, por ser infinitamente delgado, se convierte en una simple línea cerrada, órbita periódica. Por lo tanto, dentro de cada círculo de la sección de Poincaré, existirá una órbita periódica.

Si observamos la siguiente sección, $E = 0.07$, podemos notar que existe mucho parecido con la anterior. La única diferencia es que la trayectoria central se “ensanchó”, esto quiere decir que pasó de ser una trayectoria que vivía en un toro ($E = 0.035$) a una trayectoria con más libertad. Por lo tanto, esta trayectoria cubre una región bidimensional de la sección, *i.e.* es una trayectoria caótica. La región que se llena con trayectorias caóticas se llama *región caótica*. Podemos observar que el área de la región caótica es muy pequeña, esto nos indica que existen muy pocas condiciones iniciales que dan lugar a trayectorias caóticas (las que están dentro de la región caótica).

Aumentemos más la energía del sistema, $E = 0.2$, en esta sección se puede ver como la región caótica crece de tamaño, “apoderandose”, por así decirlo, de toda la parte central de la sección. Esto indica claramente que ahora existen un gran número de condiciones iniciales que dan lugar a trayectorias caóticas. Es interesante observar como dentro de regiones caóticas pueden existir regiones regulares, estas regiones se suelen llamar *islas KAM* debido a que tienen forma de islas en “un mar de puntos caóticos” que son predichas por el teorema KAM. Entonces

vemos como la región caótica puede rodear regiones regulares, *i.e.* que dentro de una zona que parece completamente caótica pueden existir órbitas cuasiperiódicas. Es más, las cuatro islas KAM del centro de esta figura, que fueron creadas por una sola trayectoria, tienen en su interior una órbita periódica. ¡Es decir que dentro de una zona caótica pueden existir incluso trayectorias periódicas!.

Si seguimos aumentando más la energía hasta $E = 0.4375$, nos damos cuenta de que llegamos a una energía para la cual casi toda la sección de Poincaré está cubierta por una región caótica. Esta región caótica fue creada por una sola trayectoria, es decir que una sola trayectoria caótica, a esta energía, puede tener cualquier tipo de movimiento. Cabe recordar que para esta energía ya se perdió la simetría, con lo que podemos concluir que dentro de esta región caótica existen al menos unas cuatro órbitas periódicas (una dentro de cada isla KAM). Entonces, para $E = 0.4375$ el caos se ha apoderado del espacio fase, solamente se salvan unas pequeñas regiones donde el orden persiste.

Pasemos a la siguiente energía, $E = 0.8$. Vemos que sucede algo sumamente sorprendente a primera vista: el área de la región caótica decrece. Se le puede dar una interpretación a esta disminución del caos para energías muy altas. Lo que sucede es que a muy altas energías el péndulo lo único que hace es dar vueltas rápidamente alrededor del punto donde se sujeta al resorte. Esto tiene como consecuencia que el resorte ya no se estire ni se contraiga mucho, por lo que nos quedamos con movimientos muy parecidos al de una masa, sujeta a un hilo inextensible, que da vueltas alrededor del punto donde se fija al hilo. También podemos observar como aparecen muchas islas KAM dentro de la región caótica, es ahora el orden que se empieza a apoderar de la situación.

Finalmente, a energías, sumamente altas, $E = 1.5$, la región caótica desa-

parece por completo y el orden se adueña del espacio fase. Sin embargo, la estructura de este espacio fase es mucho más compleja que la del espacio fase para $E = 0.035$ que también es regular. Podemos ver que para $E = 1.5$ existen una gran cantidad de islas KAM que reemplazaron la región caótica de $E = 0.4375$. Esto quiere decir que existe un gran número de órbitas periódicas para $E = 1.5$, muchas más que para $E = 0.035$, ya que dentro de cada isla KAM existe una. Cabe mencionar que la aparente estructura caótica de las islas KAM exteriores de la parte central es debida a problemas de precisión, ya que a energías tan altas la integración numérica se torna difícil. Esto último se debe a la gran velocidad que adquiere el péndulo a altas energías lo que implica una reducción forzosa del paso de integración para mantener la precisión.

Con esta serie de secciones de Poincaré presentadas en la figura (5.9) podemos extraer como conclusiones generales que existe, para el péndulo completo, una transición orden-caos a bajas energías y una transición caos-orden a altas energías. Es decir que si fuésemos aumentando la energía partiendo de la energía mínima, donde la dinámica es completamente regular, tendríamos una doble transición orden-caos-orden. De la figura (5.9) podemos deducir que la primera transición orden-caos sucede para $0.035 < E < 0.07$, y que la segunda transición caos-orden tiene lugar para $0.8 < E < 1.5$. Más adelante daremos, por medio de los exponentes de Liapunov, estas energías con un poco menos de incertidumbre.

5.3.2 Secciones de Poincaré del Péndulo Truncado

Una vez analizado el péndulo completo para $f = 0.25$ pasemos al estudio del péndulo truncado para $f = 0.25$. Como ya se mencionó, se espera que a bajas energías ambos péndulos tengan la misma dinámica, pero a altas energías

los dos van a diferir considerablemente, es más, el péndulo completo es confinante a cualquier energía en tanto que el péndulo truncado se "ioniza" a partir de E_{max} (ver ecuación (3.22)). La serie de secciones de Poincaré para el péndulo truncado con $f = 0.25$ se muestra en la figura (5.10). La energía máxima permitida para el péndulo truncado con $f = 0.25$ es $E_{max} \simeq 0.0868$ (ecuación (3.22)) y la energía en reposo es $E_{min} = 0.03125$ (ecuación (3.21)), por lo que la serie de secciones de la figura (5.10) abarca este intervalo de energías.

En la primera sección, $E = 0.035$, podemos observar como todas las trayectorias son regulares y que existen dos órbitas periódicas. En este caso también existe la misma simetría que en el péndulo completo. Como el péndulo truncado no puede tener energías altas, porque se ioniza, no llegaremos nunca a una energía suficiente para romper la simetría. Por lo tanto, en todas las secciones de Poincaré para cualquier energía y para cualquier valor del parámetro f tendremos la simetría mencionada.

Comparando la sección del péndulo truncado de la figura (5.10) para $E = 0.035$ con la correspondiente del péndulo completo podemos notar un parecido notable. Esto indica, como ya esperábamos, que los dos sistemas son muy parecidos a bajas energías.

La siguiente sección del péndulo truncado, $E = 0.04$ presenta muy poco cambio con respecto a la anterior. Esto quiere decir que todavía no se alcanza la energía de transición orden-caos. Sin embargo para la siguiente sección, $E = 0.05$, podemos observar que aparece una región caótica en el centro de la figura.

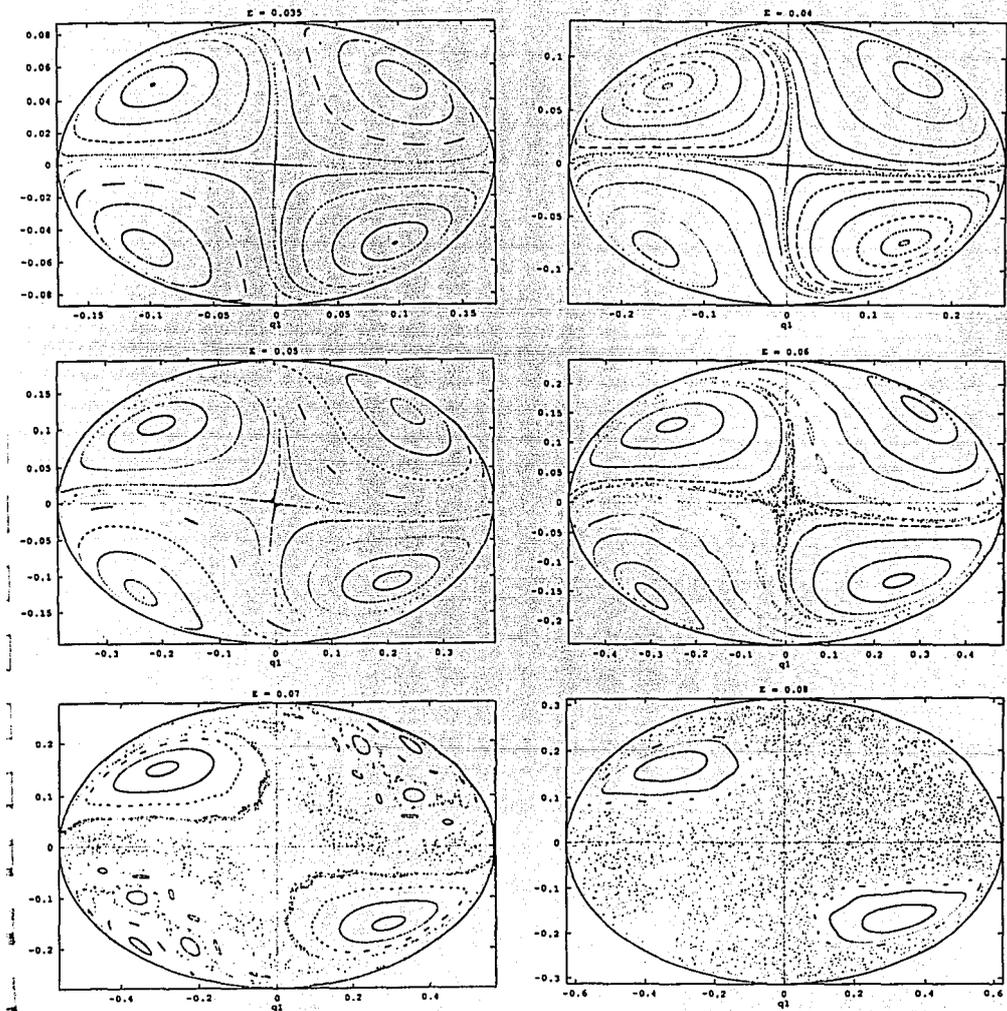


FIGURA 5.10. Secciones de Poincaré del péndulo truncado para $f = 0.25$.

Si se continua aumentando la energía, $E = 0.06$, $E = 0.07$ y $E = 0.08$, la región caótica crece y aparecen cada vez más islas KAM. El caos en el péndulo truncado aparece de la misma manera que para el péndulo completo: la órbita central se “ensancha” y va creciendo conforme se aumenta la energía. Sin embargo notamos que la transición orden-caos en el péndulo truncado se hace antes, *i.e.* a energías más bajas que para el péndulo completo. De la serie de secciones se puede concluir que la energía de transición orden-caos para el péndulo truncado con $f = 0.25$ se da para $0.04 < E < 0.05$. También se puede notar que en el péndulo truncado no existe transición caos-orden y que su dinámica a energías mayores que E_c es un tanto distinta a la del péndulo completo. Esto debido a que el desarrollo del potencial a tercer orden se parece mucho al potencial completo a bajas energías pero no es así a altas energías.

f	E_c
0.1	$0.009 < E_c < 0.01$
0.2	$0.036 < E_c < 0.04$
0.25	$0.04 < E_c < 0.05$
0.3	$0.07 < E_c < 0.09$
0.4	$0.2 < E_c < 0.25$
0.5	$0.37 < E_c < 0.50$
0.6	$0.8 < E_c < 1$
0.7	$2.3 < E_c < 2.9$
0.8	$6 < E_c < 7$
0.9	$25 < E_c < 30$

TABLA 5.1. Energía crítica de transición, E_c , del péndulo truncado, para varios valores del parámetro f , encontrada a partir de las secciones de Poincaré (figuras (5.11) a (5.19)).

Las secciones de Poincaré que se presentan a continuación nos darán una idea del valor de la energía crítica de transición orden-caos, E_c , para distintos valores de f . Estos resultados se utilizarán para dar una primera aproximación de E_c . En las figuras (5.11) a (5.19) se muestran las secciones de Poincaré del péndulo truncado para los siguientes valores de f : 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8 y 0.9. A partir de estas figuras se obtuvo la tabla anterior, tabla (5.1). Esta tabla muestra la aproximación de E_c , para distintos valores de f en el péndulo truncado, usando las secciones de Poincaré.

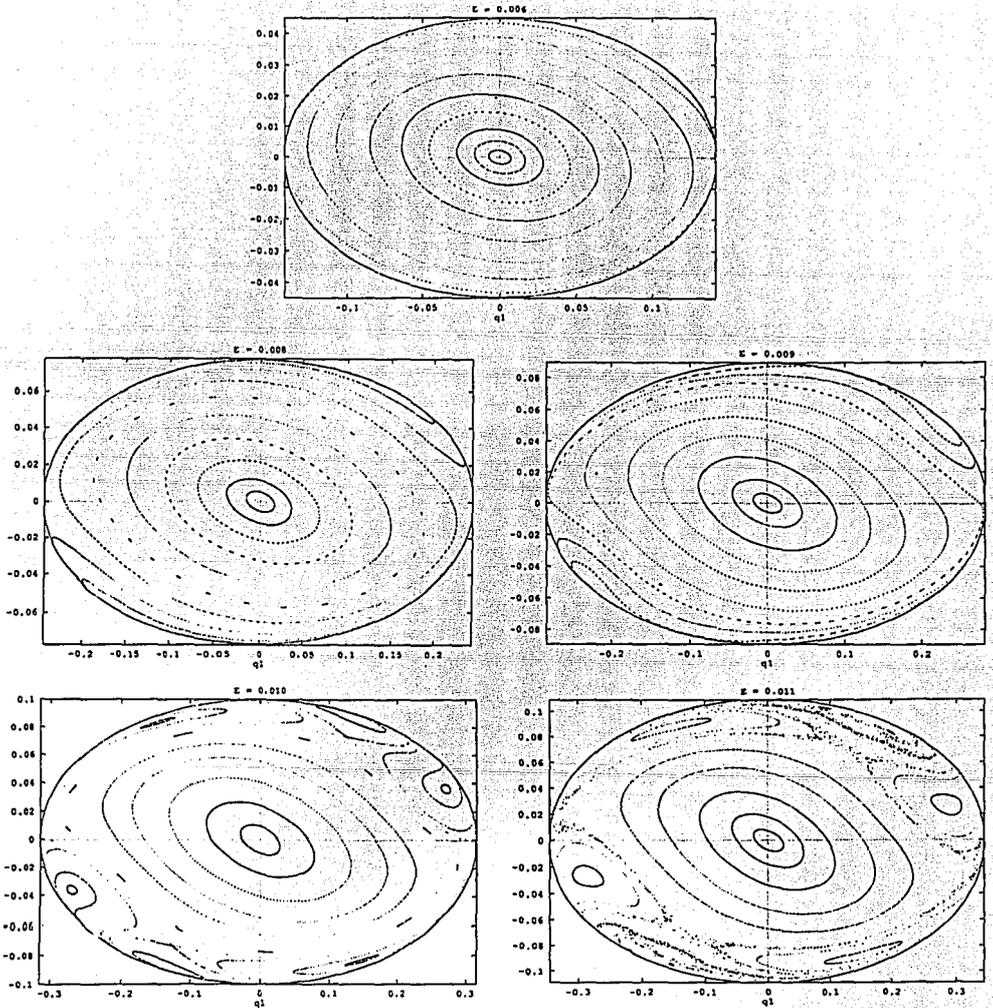


FIGURA 5.11. Secciones de Poincaré del péndulo truncado con $f = 0.1$.

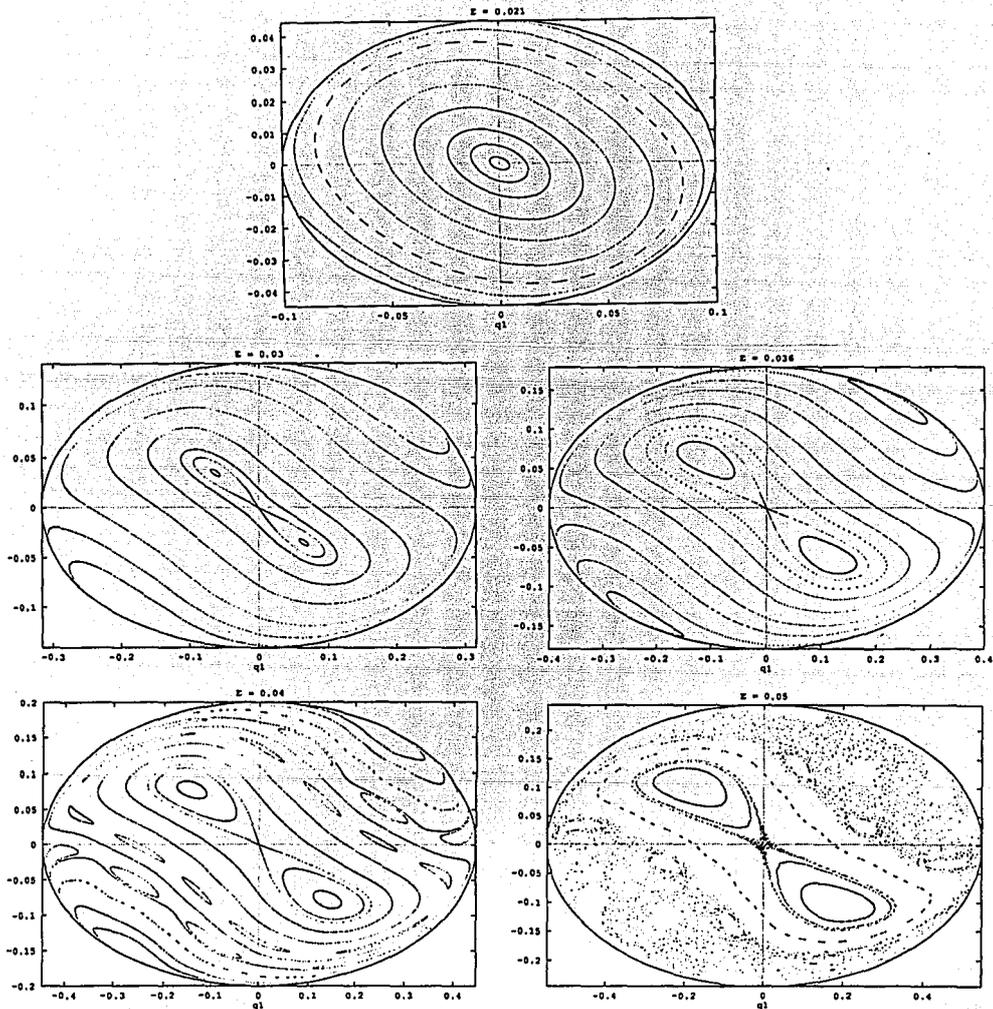


FIGURA 5.12. Secciones de Poincaré del péndulo truncado con $f = 0.2$.

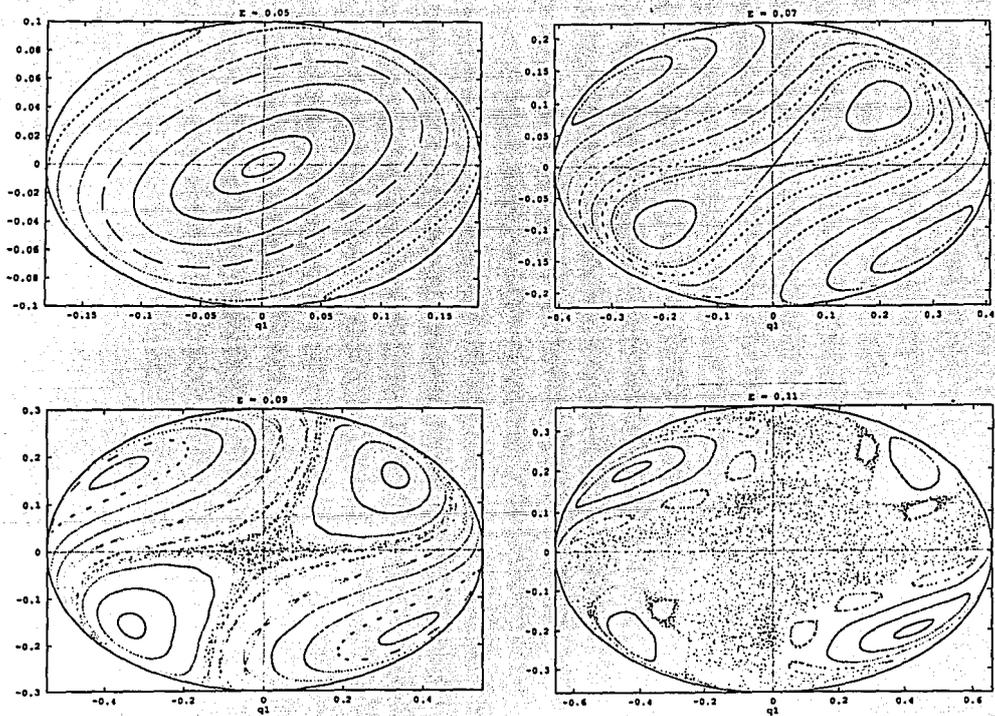


FIGURA 5.13. Secciones de Poincaré del péndulo truncado con $f = 0.3$.

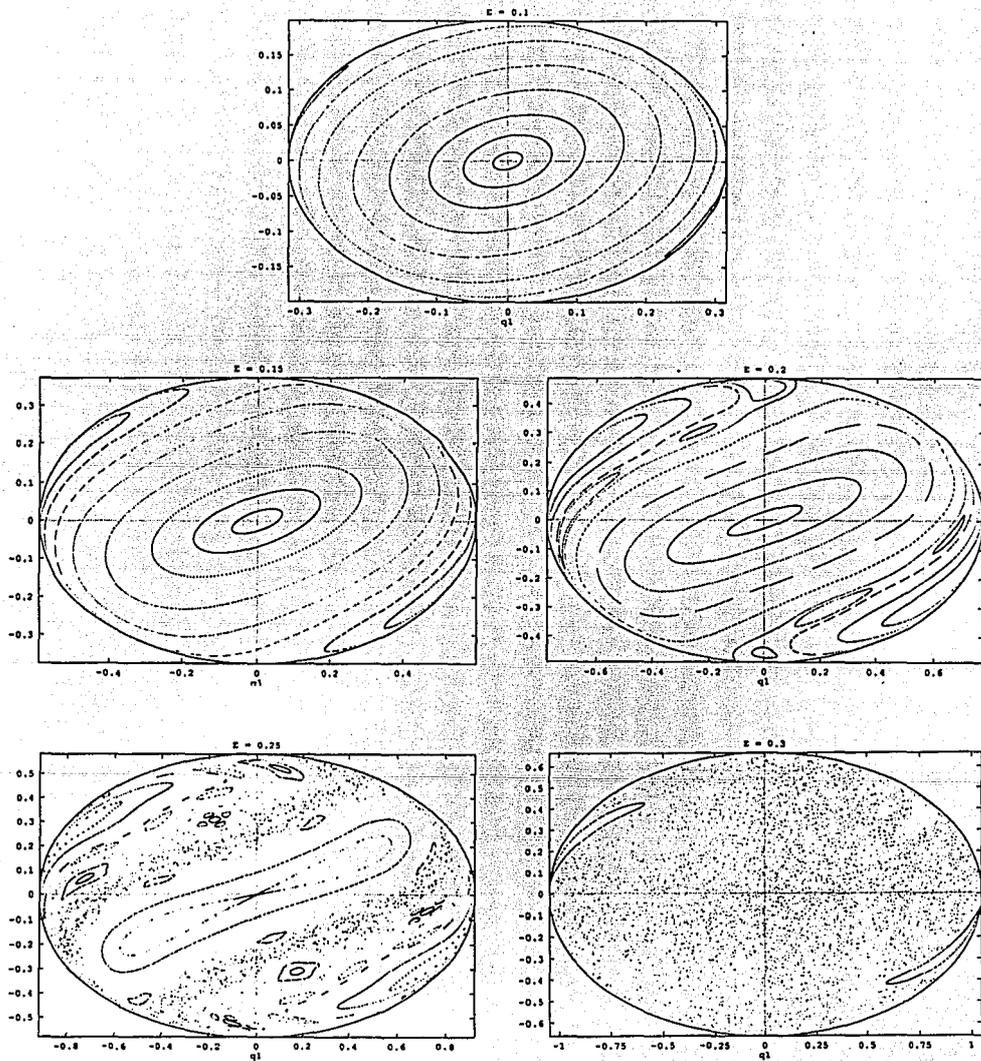


FIGURA 5.14. Secciones de Poincaré del péndulo truncado con $f = 0.4$.

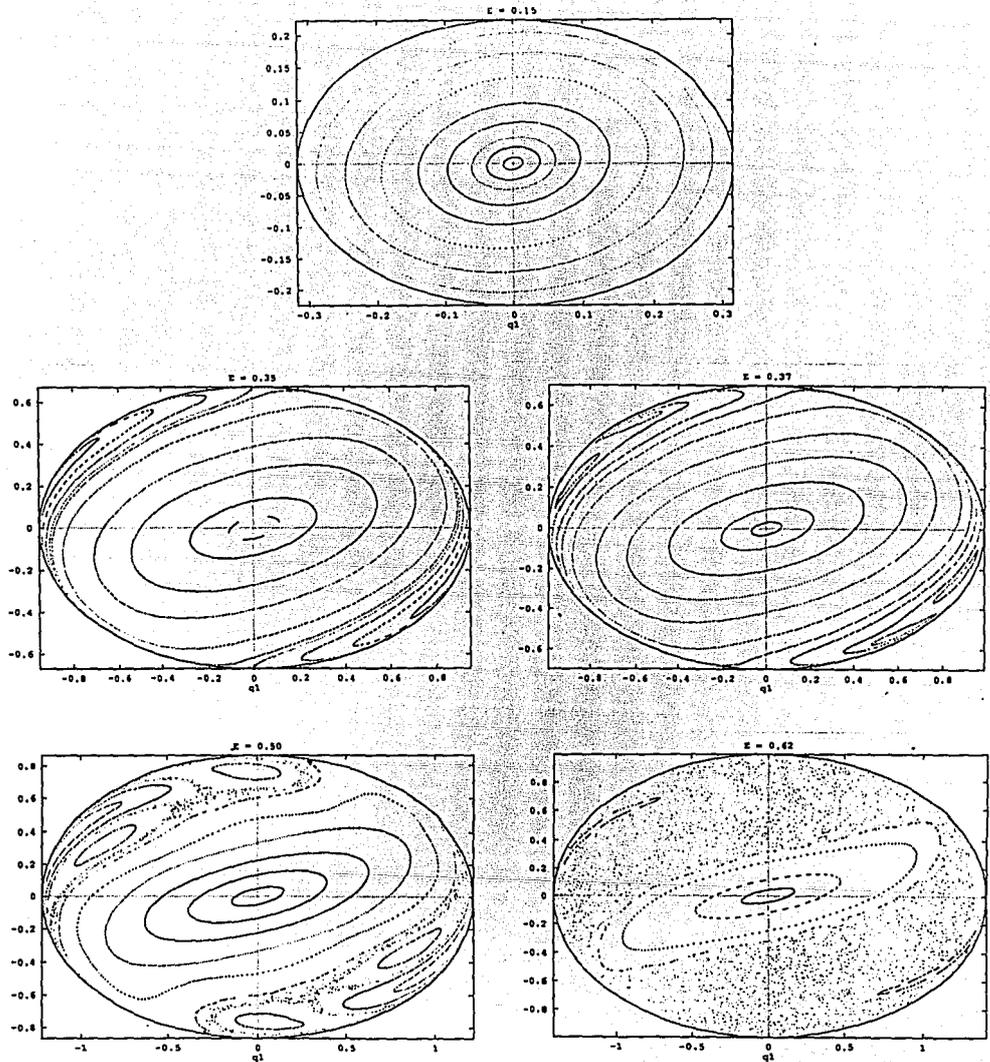


FIGURA 5.15. Secciones de Poincaré del péndulo truncado con $f = 0.5$.

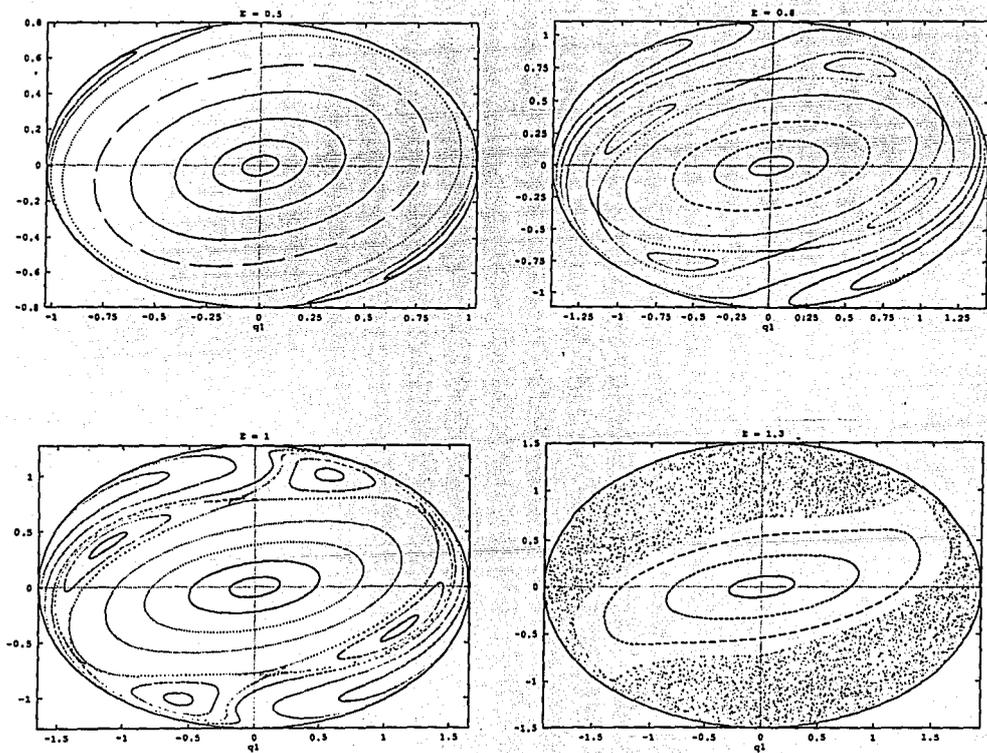


FIGURA 5.16. Secciones de Poincaré del péndulo truncado con $f = 0.6$.

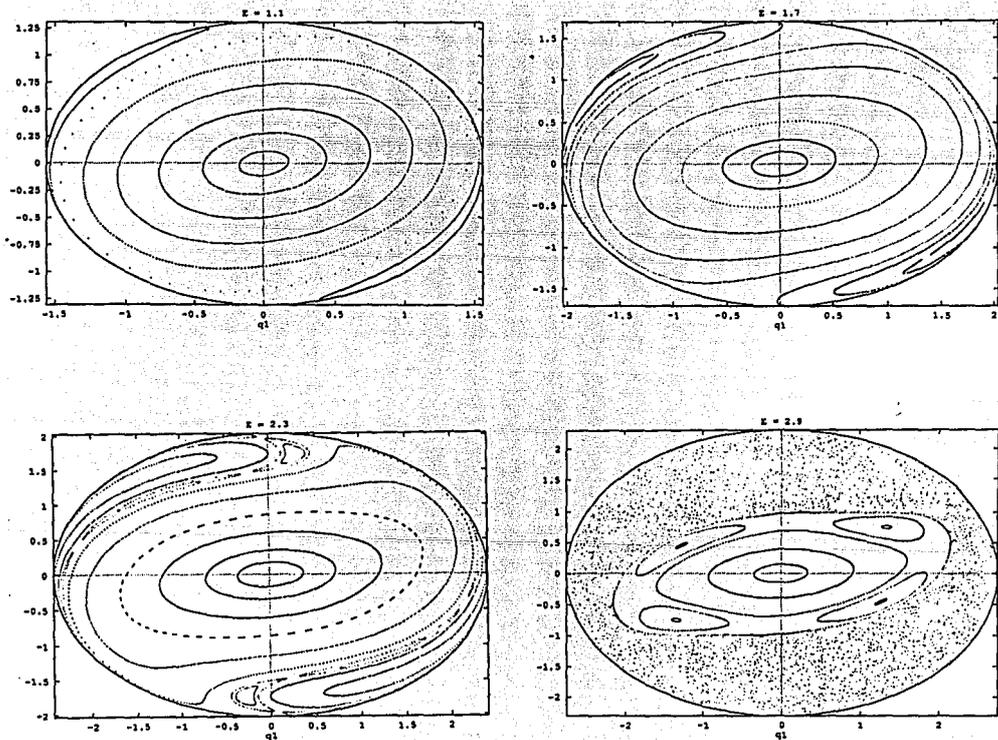


FIGURA 5.17. Secciones de Poincaré del péndulo truncado con $f = 0.7$.

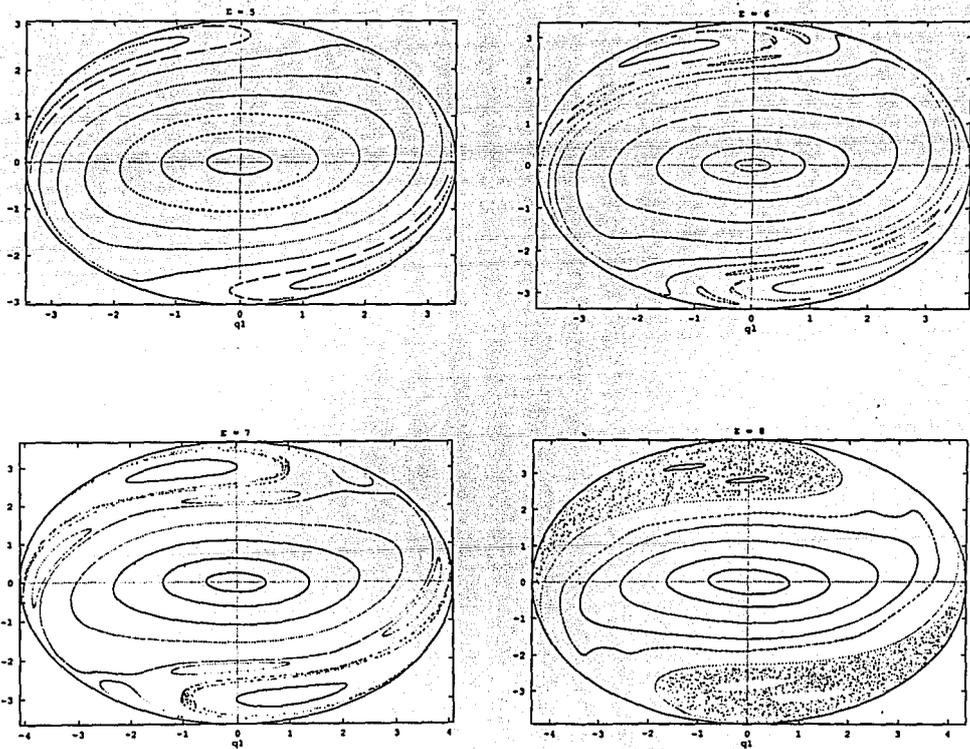


FIGURA 5.18. Secciones de Poincaré del péndulo truncado con $f = 0.8$.

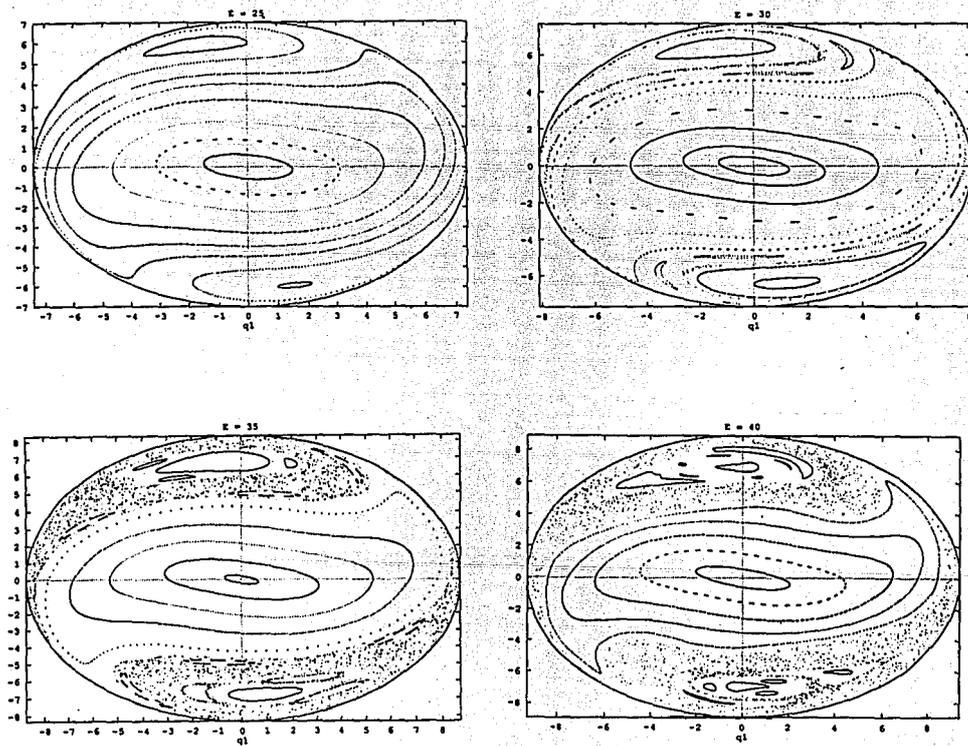


FIGURA 5.19. Secciones de Poincaré del péndulo truncado con $f = 0.9$.

5.4 Exponentes de Liapunov

Todos los métodos para la detección de caos que se han visto hasta el momento son cualitativos o no son muy precisos, nos indican la existencia de caos pero no nos dicen que tan caótico es el sistema. Para obtener una medida cuantitativa del caos en sistemas hamiltonianos se usan los exponentes de Liapunov. Como se vió, en la sección (2.4), el exponente de Liapunov indica que tan rápida es la divergencia exponencial entre condiciones iniciales cercanas: si el exponente es cero entonces no existe caos y si el exponente es positivo si existe caos. Recuerdese que usaremos la ecuación (2.14) y no la (2.15), es decir que sólo calcularemos el exponente de Liapunov más grande. Por lo tanto, las únicas posibilidades para este exponente es que sea cero o que sea positivo. Entre mayor sea el exponente más caos habrá en el sistema, *i.e.* se perderá más rápido la información de las condiciones iniciales o desde el punto de vista de las secciones de Poincaré el área de la región caótica aumentará.

Para el cálculo de los exponentes de Liapunov se utilizó el programa TRAJPOL de la MICRO VAX del IFUNAM. Este programa usa el algoritmo siguiente para calcular el exponente de Liapunov más grande. Toma dos condiciones iniciales cercanas, estas condiciones iniciales se le tienen que especificar al principio, y las deja evolucionar hasta que se separan más de d_0 (d_0 también es un dato con el que hay que alimentar al programa). Cuando la separación entre las dos condiciones iniciales originales es mayor que d_0 , digamos $|\delta\mathbf{x}|$, entonces toma una de las trayectorias y la acerca a la otra en línea recta de tal forma que su nueva separación es $|\delta\mathbf{x}|/10$. Y esta operación se repite tantas veces se quiera. Durante el proceso, el programa toma a $|\delta\mathbf{x}|$ y el tiempo en el que sucedió la contracción y actualiza el valor del exponente de Liapunov mediante la ecuación (2.14) que

repetimos a continuación.

$$\lambda \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{|\delta \mathbf{x}(t)|}{|\delta \mathbf{x}_0|}. \quad (5.1)$$

Donde $|\delta \mathbf{x}_0|$ es la separación inicial entre las dos condiciones iniciales. Hay que notar que en la ecuación anterior se toma el límite cuando el tiempo tiende al infinito. Como sabemos, es imposible hacer cualquier clase de límites con cálculo numérico de manera exacta. Por lo que el límite cuando el tiempo tiende a infinito en nuestro caso significará suficiente tiempo como para estar seguros que el exponente de Liapunov ya tendió a su valor definitivo. Esta parte es la que hace tedioso este tipo de cálculos numéricos ya que a veces hay que dejar iterar al sistema unas diez millones de veces! Lo cual implica varias horas de cálculo para encontrar un solo exponente de Liapunov.

Además existe otro problema adicional: puede ser que en un sistema para una energía dada estemos calculando el exponente de Liapunov usando dos condiciones iniciales que están fuera de la región caótica, esto traerá como consecuencia de que el exponente de Liapunov sea cero y que se piense que no existe caos. Para enfrentar este problema se utilizaron las secciones de Poincaré, ya que en ellas se puede localizar con facilidad la región caótica y de esta manera tomar las condiciones iniciales, para el cálculo del exponente de Liapunov, en la región caótica.

El problema de escoger las condiciones iniciales parece resuelto, pero no es siempre tan fácil encontrar la ubicación de la región caótica. Si observamos la serie de secciones de Poincaré del péndulo truncado para $f = 0.25$, figura (5.10), podemos deducir que la región caótica siempre está alrededor del origen. Pero tomemos ahora como ejemplo la serie de secciones de Poincaré del péndulo truncado para $f = 0.1$, en esta serie se puede observar que la región caótica no aparece

en el origen de coordenadas, sino que en algún punto no determinado del espacio fase. Esto es un serio problema que dificulta enormemente encontrar condiciones iniciales dentro de la región caótica, y no sólo eso, sino que también se puede notar que la región caótica se "mueve" conforme se aumenta la energía. Por lo que no podemos definir una región fija en el espacio fase en donde se den trayectorias caóticas.

Por lo tanto, lo que se hizo fue localizar para cada valor de la energía para cada valor del parámetro la región que parecía caótica. Luego se tomaban varias condiciones iniciales cercanas a esta región y se calculaba el exponente de Liapunov para cada una. Si alguno de esos exponentes era distinto de cero es que se había encontrado la región caótica. ¿Si todos los exponentes de Liapunov calculados daban cero querría decir que no existía caos? La respuesta es: no forzosamente. Pudiera ser que en realidad si existiese caos para esa energía pero que las condiciones iniciales que se dieron no estuviesen dentro de la región caótica. Por esta razón se tomaron varias condiciones iniciales cerca de la aparente región caótica para asegurarnos de que alguna de ellas cayera dentro de dicha región. Esto último ayuda a encontrar con mayor precisión el valor del exponente de Liapunov para una energía dada, sin embargo no es un método exacto ya que cabría la posibilidad de que ninguna de las condiciones iniciales escogidas fuera la afortunada de estar dentro de la región mencionada.

El exponente de Liapunov para cada condición inicial se encontró de la manera siguiente. El programa guarda en un archivo de datos el valor del exponente de Liapunov calculado en cada contracción. Posteriormente se analiza la curva de la evolución del exponente contra el tiempo para poder deducir a que valor tiende. Por ello es muy importante que se deje mucho tiempo corriendo el programa, ya que si no es así es imposible decir a que valor tiende el exponente de Liapunov.

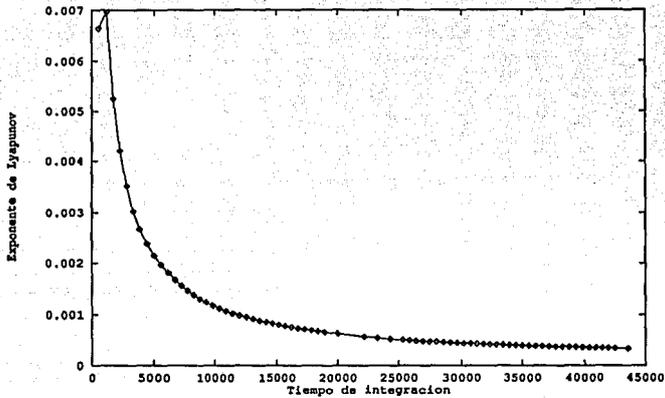


FIGURA 5.20. Evolución del exponente de Liapunov en el péndulo truncado para $E = 0.035$ y $f = 0.25$.

Como se dijo anteriormente existen dos posibilidades para los exponentes de Liapunov: que sea cero o que sea estrictamente positivo. En la figura (5.20) se muestra la evolución del exponente de Liapunov para el péndulo truncado con $f = 0.25$ y $E = 0.035$. Se puede observar como el exponente de Liapunov tiende aparentemente a cero. ¿Pero estamos seguros de que efectivamente tiende a cero? Podría ser posible que el exponente de Liapunov tendiera a un valor distinto de cero pero muy pequeño. Para estar completamente seguros lo que se hace es trazar la evolución del exponente de Liapunov en escalas logarítmicas. De esta manera, si el exponente de Liapunov tiende exponencialmente a cero, entonces su curva en escalas logarítmicas se verá como una recta de pendiente negativa.

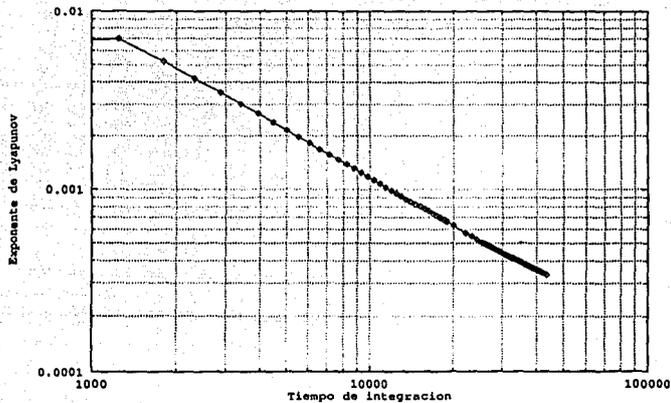


FIGURA 5.21. Evolución del exponente de Liapunov del péndulo truncado para $E = 0.035$ y $f = 0.25$ en escalas logarítmicas.

Esto es justamente lo que le sucede a la gráfica de la figura (5.21) que es la evolución del exponente de Liapunov para el péndulo truncado con $f = 0.25$ y $E = 0.035$ en escalas logarítmicas. Esto es posible ya que si no existe divergencia exponencial entre condiciones iniciales cercanas entonces el exponente de Liapunov debe tender a cero de manera exponencial, gracias a la forma como se le calcula (ecuación (5.1)).

Cuando las condiciones iniciales fueron escogidas en la región caótica la evolución del exponente de Liapunov describe una curva del estilo de la figura (5.22). En esta figura se muestra la evolución del Exponente de Liapunov para el péndulo truncado con $f = 0.25$ y $E = 0.065$. Se puede observar que el exponente de Liapunov tiende claramente a un valor distinto de cero, lo que indica la existencia de caos para esa energía.

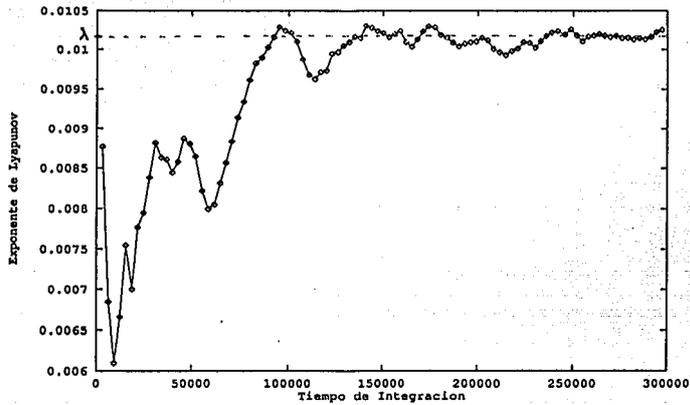


FIGURA 5.22. Evolución del exponente de Liapunov del péndulo truncado para $E = 0.065$ y $f = 0.25$.

Por lo tanto, para obtener el valor definitivo del exponente de Liapunov para una energía dada, para un valor del parámetro dado, se grafica su evolución y se toma el valor al que tiende la curva (si es que tiende a un valor distinto de cero) o se grafica con escalas logarítmicas (si parece que tiende a cero).

El procedimiento que se acaba de describir fue utilizado para calcular los exponentes de Liapunov para distintos valores de la energía para un valor fijo del parámetro. Una vez obtenidos todos los exponentes de Liapunov se les grafica en función de la energía. De esta manera se obtiene una curva que nos indica para que valores de la energía el sistema se comporta de manera regular (exponente de Liapunov igual a cero) y para que valores existe caos (cuando el exponente de Liapunov es distinto de cero).

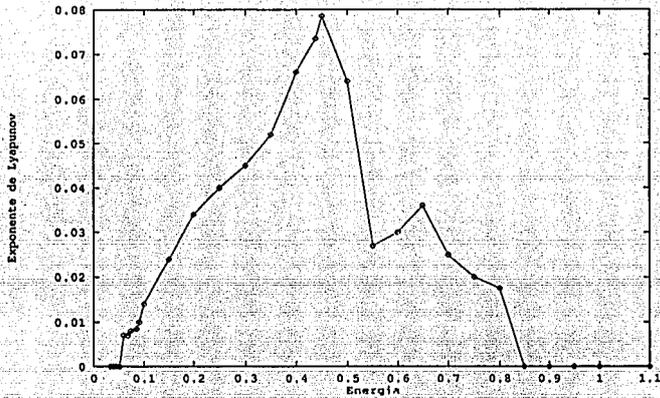


FIGURA 5.23. Exponente de Liapunov en función de la energía para el péndulo completo con $f = 0.25$.

Analizemos la figura (5.23) donde se muestra la curva del exponente de Liapunov en función de la energía para del péndulo completo con $f = 0.25$. Se puede observar que para bajas energía ($E < E_c$) el exponente de Liapunov es cero. A partir de $E = 0.052$ el exponente de Liapunov se separa de cero y comienza a crecer hasta llegar a un máximo cuando $E = 0.4375$. Este máximo corresponde a la energía de máximo caos del sistema. Para energías mayores que $E = 0.4375$ el exponente decrece hasta que finalmente se estabiliza en cero para $E \geq 0.85$. A esta última energía la llamaremos E'_c . Con esto se verifica nuevamente la transición orden-caos-orden para el péndulo completo con $f = 0.25$. En este caso la primera transición (orden-caos) sucede para $E_c = 0.052$ y la segunda (caos-orden) para $E'_c = 0.85$. Estos resultados son compatibles con los encontrados a partir de las secciones de Poincaré. Por lo tanto, la dinámica del péndulo completo para

$f = 0.25$ se resume en el esquema siguiente:

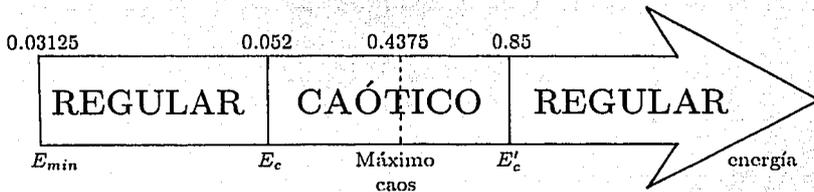


FIGURA 5.24. Comportamiento del péndulo completo para $f = 0.25$ a partir de los resultados experimentales.

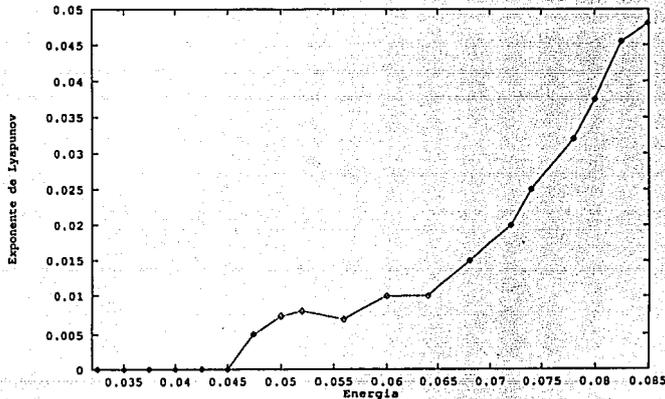


FIGURA 5.25. Exponente de Liapunov en función de la energía para el péndulo truncado con $f = 0.25$.

Ahora veamos la curva del exponente de Liapunov en función de la energía para el péndulo truncado con $f = 0.25$, figura (5.25). Se puede notar que para este sistema sólo ocurre la primera transición orden-caos. En este caso, la energía de transición es $E_c = 0.045$. Por lo tanto, el péndulo truncado tiene movimientos

regulares para energías menores que $E_c = 0.045$ y para energías mayores que este valor existen trayectorias caóticas. Note que la energía de máximo caos para este caso es justamente la energía máxima que acepta el sistema antes de ionizarse. En general veremos que la energía de máximo caos para el péndulo truncado (para cualquier f) es igual a E_{max} , con E_{max} calculado mediante la ecuación (3.22).

En la siguiente sección se muestran las curvas del exponente de Liapunov en función de la energía para distintos valores de f .

5.4.1 Exponentes de Liapunov del Péndulo Truncado

Para conocer la dinámica completa del péndulo truncado es necesario conocer la energía de transición orden-caos para cualquier valor del parámetro f . Sabemos, último párrafo de la sección 3.2, que f no puede tomar cualquier valor, sino que está restringido para valores entre 0 y 1, *i.e.* $0 \leq f \leq 1$. Es imposible encontrar numericamente E_c para cualquier valor posible de f , por eso dividiremos el intervalo de valores permitidos para f en 10 y trazaremos la evolución del exponente de Liapunov en cada división. En las figuras (5.26) a (5.32) se muestra el exponente de Liapunov en función de la energía para $f = 0.1, f = 0.2, f = 0.3, \dots, f = 0.7$ respectivamente. Los valores extremos para $f, f = 0$ y $f = 1$, no están incluidos ya que estos casos ya fueron analizados en la sección (3.5). Tampoco están los valores $f = 0.8$ y $f = 0.9$, en estos casos la integración numérica se volvió muy imprecisa y no se respetó un error relativo de 10^{-4} en la conservación de la energía, haciendo que los resultados no fuesen del todo confiables. Por esta razón, las gráficas obtenidas para $f = 0.8$ y $f = 0.9$ no se presentan en las figuras siguientes.

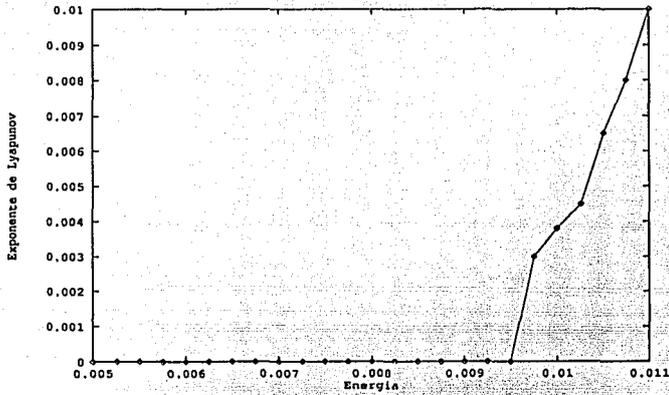


FIGURA 5.26. Exponente de Liapunov en función de la energía en el péndulo truncado para $f = 0.1$.

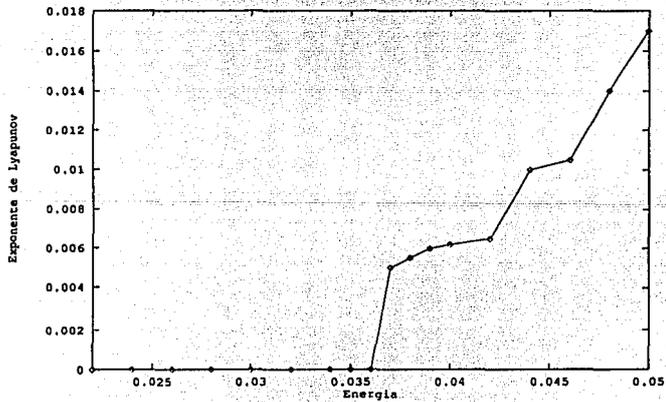


FIGURA 5.27. Exponente de Liapunov en función de la energía en el péndulo truncado para $f = 0.2$.

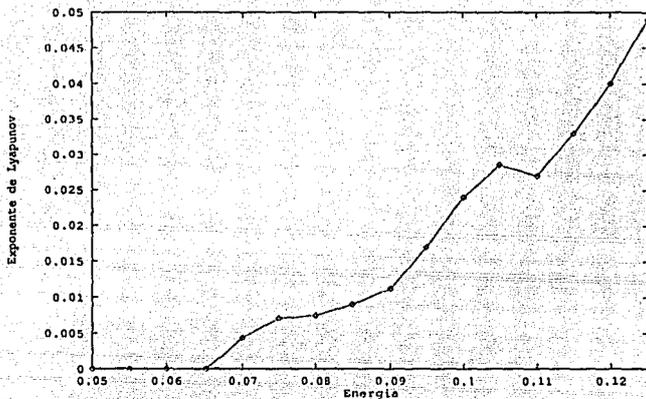


FIGURA 5.28. Exponente de Liapunov en función de la energía en el péndulo truncado para $f = 0.3$.

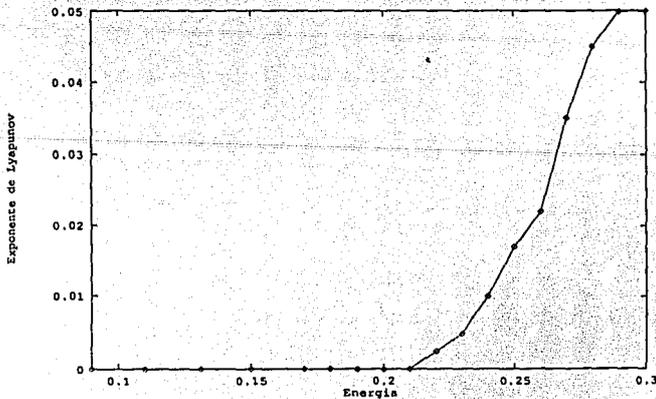


FIGURA 5.29. Exponente de Liapunov en función de la energía en el péndulo truncado para $f = 0.4$.

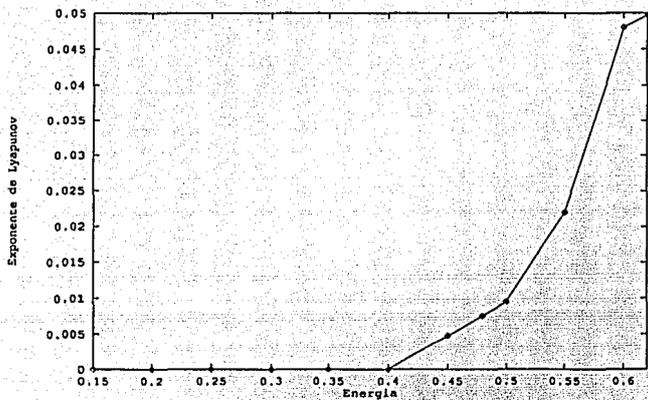


FIGURA 5.30. Exponente de Liapunov en función de la energía en el péndulo truncado para $f = 0.5$.

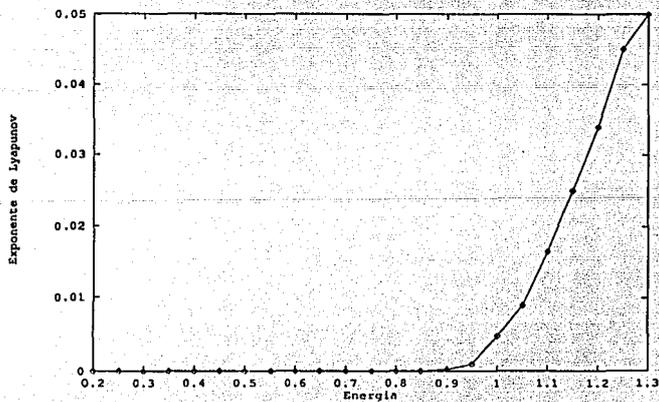


FIGURA 5.31. Exponente de Liapunov en función de la energía en el péndulo truncado para $f = 0.6$.

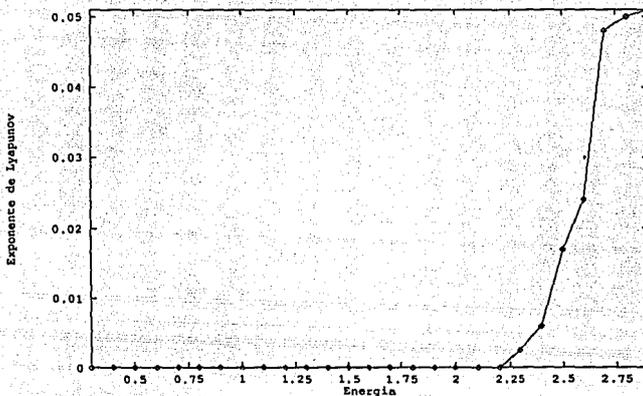


FIGURA 5.32. Exponente de Liapunov en función de la energía en el péndulo truncado para $f = 0.7$.

Como podemos observar, todas las figuras anteriores tienen un mismo comportamiento. Es decir que la dinámica del péndulo completo para distintos valores de f es similar. A bajas energías los movimientos son regulares, existe una energía crítica, E_c , de transición orden-caos y para energías mayores que esta E_c existen algunas condiciones iniciales que dan lugar a trayectorias caóticas. Podemos observar que entre más grande sea f mayor es el valor de E_c . Con esta serie de gráficas podemos decir cuanto vale E_c para varios valores de f , estos resultados serán ilustrados en la siguiente sección.

5.5 Resultados Finales y Conclusiones

Finalmente comparemos la energía crítica de transición orden-caos, E_c , encontrada a partir de las gráficas anteriores, con la calculada por medio del criterio de la curvatura gaussiana negativa, propuesto en capítulo 4. En la tabla siguiente se presentan la energía crítica de transición orden-caos para el péndulo truncado para varios valores de f calculada mediante los exponentes de Liapunov (experimentalmente) y mediante el criterio de la curvatura gaussiana negativa (ecuación 4.46), así como el error porcentual de los resultados encontrados con el criterio de la curvatura gaussiana con respecto a los resultados experimentales.

f	E_c experimental	E_c teórica	error porcentual
0.1	0.0095	0.0081	-14.88%
0.2	0.037	0.0356	-3.72%
0.25	0.045	0.0590	31.17%
0.3	0.065	0.0909	39.87%
0.4	0.22	0.1911	-13.13%
0.5	0.4	0.3750	-6.25%
0.6	0.85	0.7425	-12.65%
0.7	2.2	1.6061	-26.99%

TABLA 5.2. Energía de transición orden-caos, E_c , del péndulo truncado, para varios valores del parámetro f , encontrada experimentalmente y por medio del criterio de la curvatura gaussiana.

Los resultados de la tabla (5.2) muestran un error porcentual bastante alto en la mayoría de los datos. Sin embargo, para algunos datos ($f = 0.2$ y $f = 0.5$), el error porcentual es menor que el 10%. Para poder comparar los dos métodos de manera gráfica usemos la figura (5.33). En esta figura se graficaron, en función

del parámetro f : los puntos experimentales de la energía crítica de transición orden-caos (rombos), la curva de transición orden-caos predicha por el criterio de la curvatura gaussiana (línea punteada central), la energía mínima que puede tener el sistema (línea punteada inferior) y la energía máxima permitida por el sistema antes de la ionización (línea punteada superior).

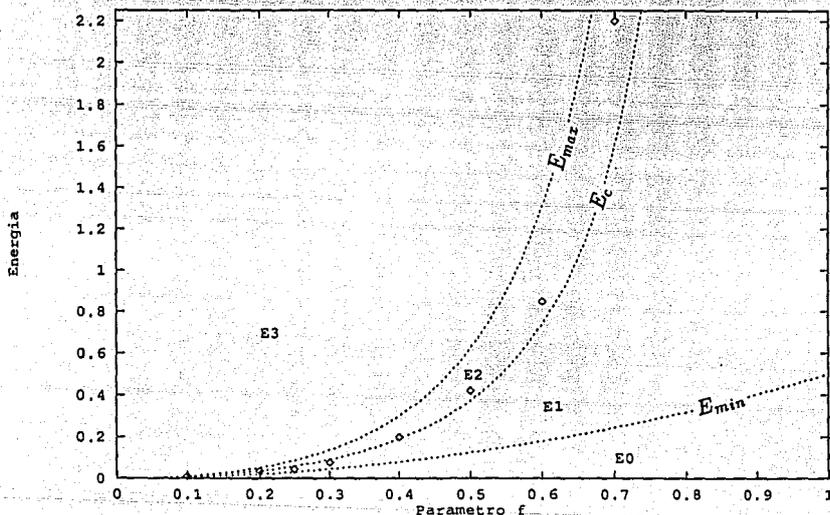


FIGURA 5.33. Diagrama de fases del péndulo truncado. E_0 : región inaccesible, E_1 dinámica regular, E_2 región caótica y E_3 péndulo ionizado. Los rombos son los resultados experimentales y la línea punteada central fue obtenida con el criterio de la curvatura gaussiana.

De esta manera, en la figura (5.33), E_0 representa una energía inaccesible para el sistema ya que sería menor que E_{min} . E_1 representa energías menores que E_c , i.e. energías para las cuales el sistema es regular. E_2 ya es una energía mayor

que E_c por lo tanto en esta región existen trayectorias caóticas. Finalmente, E_3 representa una energía mayor que E_{max} por lo que el péndulo en esta región se ioniza. Por lo tanto, la figura (5.33) es el diagrama de fases del péndulo truncado, *i.e.* nos muestra su dinámica en función de la energía y del parámetro f . Con esta figura, dados una energía y un valor del parámetro f , podemos de inmediato saber que tipo de dinámica va presentar el péndulo truncado. Por ejemplo, si $E = 0.8$ y $f = 0.55$ sabremos que existirá caos, o si $E = 0.2$ y $f = 0.5$ sabremos que todas las trayectorias serán regulares, o si $E = 1$ y $f = 0.3$ sabremos que el péndulo se ionizará, *i.e.* que la masa se escapará al infinito, etc. De ahí el nombre de diagrama de fases que se escogió para esta figura.

La figura (5.33) nos muestra gráficamente la comparación entre los datos experimentales y la curva obtenida mediante el criterio de la curvatura gaussiana que llamaremos *curva teórica*. Se puede observar que los datos experimentales permanecen bastante próximos a la curva teórica, sobre todo para bajas energías. A altas energías los puntos experimentales se separan un poco de la curva teórica. Sin embargo, el resultado más interesante es que la curva teórica y los datos experimentales tienen una misma tendencia. Esto último es muy importante ya que nos muestra que el criterio de la curvatura gaussiana predice la tendencia que tiene la curva donde se da la transición al caos.

Entonces, el criterio de la curvatura gaussiana nos da una aproximación bastante rápida de la energía crítica de transición orden-caos. Basta con calcular la curvatura gaussiana del potencial, haciendo unas cuantas derivadas (ecuación (4.32)), y encontrar la energía mínima necesaria para alcanzar un punto del potencial con curvatura gaussiana negativa. Por lo que este criterio es muy sencillo y muy rápido comparado con el cálculo numérico de los exponentes de Liapunov (que puede llevar hasta una día completo para un solo exponente para una energía

dada y un valor del parámetro. Por lo tanto, el criterio de la curvatura gaussiana es rápido pero no es tan preciso, sin embargo nos puede indicar muy bien la tendencia de la energía crítica de transición en sistemas bidimensionales de manera cualitativa y de inmediato. Obviamente este criterio no podía ser del todo exacto ya que al desarrollarlo se hizo una aproximación. Además, este criterio es el más sencillo que se conoce, hasta la fecha, para la predicción de caos en sistemas hamiltonianos.

Cabe mencionar que el criterio de la curvatura gaussiana sólo se estudió para un caso particular en este trabajo: el péndulo extensible bidimensional con el potencial truncado a tercer orden. Por otro lado, este criterio sólo se puede aplicar a sistemas hamiltonianos bidimensionales. Para poder proponer un criterio para sistemas de más dimensiones se tendría que analizar la matriz de evolución de una pequeña perturbación para las dimensiones que tenga el sistema y buscar la energía máxima que el sistema pueda tener sin que alguno de los valores propios de la matriz sea real. Sin embargo, la diagonalización de la matriz de evolución de la perturbación para sistemas de más de dos dimensiones no será sencilla, es más, en la mayoría de los casos será imposible, analíticamente hablando. Por lo que entrarían nuevamente métodos numéricos.

Sería interesante, como seguimiento de este trabajo, analizar el caso de sistemas hamiltonianos con más grados de libertad y poder corroborarlos con resultados numéricos. Esto sería de gran interés para el estudio de potenciales intramoleculares, donde existen muchos grados de libertad, ya que con aplicar un criterio similar al de este trabajo se podría saber cualitativamente el comportamiento de la energía crítica de transición orden-caos.

REFERENCIAS

- Bolotin Yu.L., Gonchar V.Yu., Tarasov V.N. y Chekanov N.A. 1989, *Phys. Lett. A*, **135**, 29.
- Breitenberger E. y Mueller R.D. 1981, *J. Math. Phys.*, **22**, 1196.
- Broucke R. y Baxa P.A. 1973, *Celest. Mech.*, **8**, 261.
- Califano S. 1976, *Vibrational states* (Wiley, New York), sección 9.6.
- Champeney D.C. 1987, *A handbook of Fourier series* (Cambridge Univ. Press), cap. 11.
- Contopoulos G. 1963, *Astron. J.*, **68**, 763.
- Cuerno R., Rañada y Ruiz-Lorenzo J.J. 1992, *Deterministic chaos in the elastic pendulum*, *Am. J. Phys.*, **60** (1) 73.
- Gould H. y Tobochnik J. 1988, *An Introduction to Computer Simulation Methods, Applications to Physical Systems, Part1* (Addison-Wesley).
- Hénon M. y Heiles C. 1964, *Astron. J.*, **69**, 76.
- Hori G.H. 1966, *Publ. Astron. Soc. Japan*, **18**, 287.
- Kane T.R. y Khan M.E. 1968, *J. Appl. Mech.*, **35**, 547.
- Kernigal B.W. y Ritchie D.M. 1985, *El lenguaje de programación C* (Prentice Hall).
- Kuzmin M.V. y Stuchebrukhov A.A. 1989, *Laser spectroscopy of highly vibrationally excited molecules* (Adam Hilger), cap. 4: Dynamical chaos and intramolecular vibrational relaxation in polyatomic molecules.
- Li T.Y. y Yorke J.A. 1975, *Periodic three implies chaos*, *Am. Math. Monthly*, **82**, 985

- Lignelet P. 1985, Fortran 77-Lenguaje Fortran V (Mussou, S.A. Paris).
- Lorenz E.N. 1963, Deterministic nonperiodic flow, *J. Atmos. Sci.*, **20**, 130.
- Narkis Y. y Angew. Z. 1977, *Math. Phys.*, **28**, 343.
- Núñez-Yépez H.N., Salas A.L. y Vicente L. 1990, Onset of chaos in an extensible pendulum, *Phys. Lett. A*, **145** (2:3) 101.
- Núñez-Yépez H.N., Salas A.L., Vargas C.A. y Vicente L. 1991, Sobre predicibilidad y caos en sistemas clásicos, *Educación Química*, **3** (1) 64.
- Pippard A.B. 1983, The physics of vibrations, Vol. 2 (Cambridge Univ. Press, Cambridge), cap. 15.
- Pesin Ya B. 1977, *Russian Math Surveys*, **32** (4) 55-114.
- Press W.H., Flannery B.D., Teukolsky S.A. y Vetterling W.T. 1988, Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing (Cambridge Univ. Press).
- Sánchez G.I. 1991, Dinámica de un grifo gotear: Estudio numérico de un modelo mecánico, Tesis de Licenciatura, UNAM.
- Toda M. 1974, *Phys. Lett. A*, **48**, 335.
- Tsel'man F.K. 1970, *J. Appl. Math. Mech.*, **34**, 916.