UC Universidad de Cantabria

Facultad de Ciencias

El Problema de la Equipartición de la Energía en la Cadena Fermi-Pasta-Ulam

The Problem of Equipartition of Energy in the Fermi-Pasta-Ulam Chain

> Trabajo de Fin de Grado para acceder al

GRADO EN FÍSICA

Autor: Pablo Muñoz Lara Director: Diego Pazó Bueno Septiembre de 2024

Resumen

En este trabajo se lleva a cabo una revisión del conocido problema de la equipartición de la energía en la cadena Fermi-Pasta-Ulam (FPU). Inicialmente, se presenta el experimento original de Fermi, Pasta y Ulam junto con el desarrollo histórico y científico que le sigue, el cual se extiende hasta la actualidad. Se tratarán los conceptos y temas básicos en relación con la cadena FPU, desde la derivación formal de las ecuaciones del sistema hasta las técnicas de integración geométricas que permiten llevar a cabo su simulación por computadora, pasando por los conceptos de integrabilidad y ergodicidad entre otros. Tras toda esta presentación del tema, en la que ya se comentan algunos detalles a nivel fenomenológico, veremos una serie de mediciones y resultados que traten de ilustrar el comportamiento de este sistema en la medida de lo que se conoce en la actualidad. Durante el proceso, se mostrarán algunas herramientas y procedimientos experimentales para medir ciertas cantidades características en los sistemas FPU. En un todo, este texto constituye una guía de iniciación al problema de la equipartición de la energía en la cadena FPU accesible, actualizada y con carácter práctico.

Palabras Clave: cadena FPU, equipartición de la energía, sistemas no lineales, recurrencia FPU, metaestabilidad

Abstract

The present work is a review on the so-called problem or equipartition of energy in the Fermi-Pasta-Ulam (FPU) chain. At first, the original experiment of Fermi, Pasta, and Ulam is presented, along with a brief discussion of its history up to the present. The main concepts about the FPU chain will be covered, from the derivation of the system's equations to the methods of geometric integration that are required for simulating the system, and also basic ideas such as integrability and ergodicity. Following this presentation of the issue, in which some of the phenomenological aspects are already mentioned, there are several measurements and results that help illustrate the behavior of this system to the point it is known nowadays. During the process, we will see a demonstration of some experimental techniques designed to measure some of the characteristic quantities of the FPU systems. In general, this text is intended to serve as a beginner's guide to the problem or equipartition of energy in the Fermi-Pasta-Ulam chain that is easy to follow, updated, and focused on practical aspects.

Keywords: FPU chain, equipartition of energy, nonlinear systems, FPU recurrence, metastability

Índice general

1.	Introducción al Experimento FPU.	1
	1.1. Experimento FPU	1
	1.2. Sistemas Hamiltonianos e Integrabilidad	4
	1.3. Equipartición de la Energía y Termalización.	7
	1.4. Modulación de la Cadena FPU y el Estado Metaestable.	9
	1.5. Objetivos	12
2.	Cadena FPU.	13
	2.1. Sistema de la Cadena FPU	13
	2.2. Aproximación Lineal y los Modos Normales	16
3.	Métodos de Integración Geométrica.	21
	3.1. Métodos de Integración Numérica.	21
	3.2. Pruebas de los Métodos de Integración.	25
4.	Resultados sobre la Cadena FPU.	31
	4.1. Recurrencia y Superrecurrencia FPU.	31
	4.2. Herramientas para la Caracterización de Macroestados.	34
	4.3. Parámetros de la Cadena FPU	38
	4.4. Tiempos Característicos de la Recurrencia.	41
	4.5. Localización de la Energía en la Cadena FPU y Termalización.	44
5.	Conclusiones.	47

Capítulo 1

Introducción al Experimento FPU.

Este capítulo comienza con una presentación del experimento original de Fermi, Pasta y Ulam (FPU) en la que se expone su planteamiento y resultados, y donde también se habla de los trabajos posteriores que inspiró este descubrimiento. Seguidamente, se introduce una serie de temas que serán necesarios a la hora de abordar e interpretar resultados concretos sobre la cadena FPU. Resumidamente, los temas que se verán versan sobre los conceptos de integrabilidad de un sistema hamiltoniano, ergodicidad y equipartición de la energía, y también se discute sobre el tiempo de recurrencia de Poincaré en el sistema que se estudia y sobre las aproximaciones de nuestro sistema discreto y no integrable por un sistema integrable continuo (ecuación KdV y solitones) y por un sistema discreto integrable (red de Toda).

Para la realización de esta sección, indudablemente se ha utilizado [FPU, 1955]. El apartado histórico se fundamenta en [Weissert, 1997] y [BCGG, 2008], aunque también se utiliza información de las propias publicaciones que se referencian en él. La bibliografía para las secciones posteriores consiste en: [LaLi, 1978] para los métodos de la formulación lagrangiana y hamiltoniana, [Hall, 2013] para sistemas hamiltonianos, [Solana, 2018] para el epígrafe sobre ergodicidad y equipartición de la energía, [Shannon, 1948] para las notas sobre información y entropía de Shannon, y [BCGG, 2008] para la sección de solitones, sacando de [DPR, 2005] las ecuaciones para el tiempo de recurrencia FPU que predice el modelo de solitones y la red de Toda, y sacando de [PoBa, 2005], [LoPa, 2006] y [OVPL, 2014] el resto de relaciones cualitativas.

1.1. Experimento FPU.

A continuación se presenta el artículo original [FPU, 1955]. Se comentan brevemente el experimento y las expectativas iniciales, así como el impacto que ha tenido el descubrimiento realizado y la originalidad de la técnica experimental empleada. Trataremos de exponer el desarrollo histórico que siguió a todo esto, desde los primeros años posteriores al experimento y hasta llegar al panorama actual.

En el año 1952, el grupo formado por el físico Enrico Fermi, el informático John Pasta y el matemático Stanislaw Ulam, quienes trabajaban en el laboratorio científico de Los Álamos de la Universidad de California, comenzaron a discutir sobre el potencial que tenía el computador MANIAC-I para atacar aquellos sistemas mecánicos que no admiten una solución analítica. Pese a que la formulación de la mecánica clásica permite dar las ecuaciones del movimiento de los sistemas mecánicos, estas no siempre pueden resolverse. La alternativa es el cálculo numérico de sus soluciones, pero hacer esto con lápiz y papel resulta una tarea impensable. La idea de Fermi, Pasta y Ulam fue utilizar este computador para poder realizar dichos cálculos a una velocidad sin precedentes, es decir, tomaron el sistema no lineal más sencillo posible, a su juicio, y calcularon sus trayectorias numéricamente. Dicho sistema se conoce como la cadena FPU y consiste en una cadena unidimensional de N partículas idénticas con masa m, las cuales interaccionan de manera lineal salvo en una pequeña perturbación no lineal. Si se denota por q_1, \ldots, q_N la separación de cada una de estas partículas respecto de su posición de equilibrio, el movimiento está regido por la siguiente función hamiltoniana:

$$H(q,p) = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^{N} p_j^2 + \frac{\kappa}{2} \sum_{j=1}^{N+1} (q_j - q_{j-1})^2 + \frac{\alpha}{3} \sum_{j=1}^{N+1} (q_j - q_{j-1})^3 + \frac{\beta}{4} \sum_{j=1}^{N+1} (q_j - q_{j-1})^4, \quad (1.1)$$

donde p_j es el momento generalizado de q_j , κ , $\alpha \neq \beta$ son constantes y se adoptan las notaciones $q = (q_1, \ldots, q_N)$, $p = (p_1, \ldots, p_N)$. La constante κ es positiva y va con el término lineal del hamiltoniano, mientras que $\alpha \neq \beta$ son las constantes de las perturbaciones cuadrática y cúbica del hamiltoniano (terminología que se refiere al exponente de las fuerzas y no al del potencial). El sistema con perturbación cuadrática se conoce como la cadena α -FPU, y el sistema con perturbación cúbica se llama cadena β -FPU. Estos sistemas pueden verse como una aproximación del sistema de la cuerda vibrante continua o de un sólido unidimensional, por ejemplo. Cabe destacar que los modos normales, tema central en cualquier análisis sobre la cadena FPU, surgen de un cambio de variable en el hamiltoniano (1.1) con potencial armónico ($\alpha = \beta = 0$). Puede transformarse el hamiltoniano entero con dicho cambio de variables:

$$H(\eta,\sigma) = \frac{1}{2m} \left(\sum_{k=1}^{N} \sigma_k^2 + \sum_{k=1}^{N} (m\omega_k \eta_k)^2 \right) + \sum_{j=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} \eta_j \eta_k \eta_l \left[\alpha \gamma_{j,k,l} + \beta \sum_{m=1}^{N} \chi_{j,k,l,m} \eta_m \right],$$
(1.2)

donde $\eta = (\eta_1, \ldots, \eta_N)$ representan a los modos normales, $\sigma = (\sigma_1, \ldots, \sigma_N)$ son sus momentos conjugados, cada ω_r es la frecuencia característica asociada al modo η_r , y $\gamma_{j,k,l}$, $\chi_{j,k,l,m}$ son unas constantes que no nos molestaremos en dar de forma explícita. Con frecuencia hablaremos de los modos más bajos refiriéndonos a aquellos modos con menor frecuencia característica.

Fermi trabajó previamente, durante la década de 1920, en una prueba sobre la propiedad ergódica en los sistemas no lineales. Al no disponer de herramientas para calcular las trayectorias de forma analítica ni tampoco numérica, la idea que se barajaba era la de que la no linealidad de los sistemas hacía que fuesen ergódicos y que estos evolucionasen hacia la equipartición de la energía. Fermi fue criticado por la falta de rigor en sus argumentos y, de hecho, él mismo 'desmentiría' su conjetura con los resultados del experimento FPU. Decimos que la 'desmintió' porque años después se vio que la cadena FPU sí que evoluciona hacia la equipartición de la energía pasado un largo tiempo.

Fermi, Pasta y Ulam esperaban observar una rápida tendencia hacia la equipartición de la energía entre los modos normales del sistema. La idea era situar inicialmente toda la energía en el modo fundamental (esto es el modo con menor frecuencia característica), observar cómo esta iba fluyendo poco a poco por el resto de modos hasta darse la equipartición y medir el tiempo que tarda en darse la termalización del sistema. Las primeras pruebas que se realizaron resultaron exitosas, en el sentido de que observaban como el modo fundamental perdía energía y la iban ganando los siguientes modos, en orden creciente de frecuencia característica. La sorpresa vino cuando un día, por un despiste, dejaron corriendo la máquina más tiempo de que se pretendía. Ahí observaron que tan solo los modos de bajas frecuencias ganaban una cantidad significativa de energía y que además iban variando su energía describiendo en una especie de ciclo repetitivo o recurrencia. Es decir, que ante un estado inicial donde tan solo se excitaba al modo fundamental, este iría compartiendo su energía con los siguientes modos de frecuencias bajas y que en un determinado momento, la configuración volvería a un estado en el que casi toda la energía estaría en el modo fundamental. Este fenómeno se conoce como recurrencia FPU.

El trabajo se completó en el año 1955, pese al repentino fallecimiento de Fermi en noviembre del año anterior. Este no llegó a publicarse, pero el boca a boca hizo que ganase notoriedad en determinados círculos. Tuvo éxito, por un lado, el uso original de una computadora para llevar a cabo la simulación de un sistema mecánico, hasta el punto de que hoy en día se realizan estos experimentos computacionales dentro de esta y muchas otras disciplinas. Es decir, se ha consolidado como otro procedimiento de investigación en física, junto a la física experimental y la física teórica.

Por otro lado, el descubrimiento de recurrencia en un sistema débilmente perturbado motivó diversas líneas de investigación. La idea de que los sistemas no lineales eran necesariamente ergódicos no era compatible con la evidencia experimental, y también quedaba sin resolver la cuestión de qué mecanismo físico hay detrás de esta recurrencia. Esta cuestión sigue abierta a día de hoy pese a los numerosos avances que han tenido lugar desde entonces.

3

En los años posteriores a la finalización del experimento, aparecieron varios trabajos de J. Ford (1961 y otro en 1963 junto a su alumno J. Waters) y de E. A. Jackson (1963, en dos partes). En ellos se trataba de explicar el fenómeno, concluyendo en ocasiones que la elección de los parámetros del experimento era patológica (por ejemplo, el número de partículas N se escogió originalmente como una potencia de 2 para facilitar el cálculo en la computadora) y llegando también a aproximar el perfil del ciclo de recurrencia (esto se refiere a las energías de los modos frente al paso del tiempo) por cálculos teóricos basados en teoría de perturbaciones, sin éxito. También, en el año 1961 y equipados con una maquinaria más capaz, J. L. Tuck y M. T. Menzel simularon de nuevo la cadena FPU por un tiempo significativamente mayor. El resultado fue el descubrimiento de una superrecurrencia FPU. En la recurrencia FPU el modo fundamental pierde energía en los sucesivos ciclos, pero resulta que tras un cierto número de ciclos la energía del modo fundamental empezaría a subir hasta aproximarse mucho más a la energía total, y entonces comenzaría a bajar de nuevo resultando en un comportamiento recurrente. Tuck y Menzel también simularon la cadena FPU para el valor N = 17 primo, y observaron que se seguía produciendo recurrencia y superrecurrencia. Sus hallazgos se transmitieron por vía oral, pero escribirían [TuMe, 1972] años más tarde a petición de la comunidad científica, para poder citar a una referencia escrita.

Cierta conjetura de A. Kolmogórov de 1954 sobre el comportamiento cuasi periódico de sistemas lineales débilmente perturbados fue ganando interés en aquellos años, hasta el punto de que en 1963, V. Arnold y J. Moser probarían dicha conjetura de manera independiente. Esto supuso el nacimiento de lo que hoy se conoce como teoría KAM. El resultado principal de esta teoría es esa conjetura de Kolmogórov, conocida ahora como teorema KAM, la cual dice que en un sistema integrable débilmente perturbado siguen existiendo unas superficies invariantes en el espacio de fases, en el sentido de que las trayectorias de dichos sistemas no evolucionan libremente por todos los microestados con la misma energía y por ello no se tiene la ergodicidad. Sin embargo, estas ideas no podían explicar la recurrencia FPU, no al menos para los valores de los parámetros α y β en los que el sistema exhibe recurrencia pero que resultan ser demasiado grandes para satisfacer los supuestos de la Teoría KAM.

Otra forma de atajar el problema se remonta a la segunda mitad de la década de 1960. En un artículo de 1965 titulado "Interaction of 'solitons' in a collisionless plasma and the recurrence of initial states" y publicado por N. J. Zabusky y M. D. Kruskal, los autores rescatan la ecuación de Korteweg-de Vries (KdV) de las 'ondas solitarias' (rebautizadas como solitones) para estudiar la interacción de estas soluciones como modelo de un plasma. Zabusky, quien ya hubo publicado sobre la cadena FPU, reconoció la utilidad de la ecuación KdV para modelar el perfil de la cadena α -FPU. Resultó ser un ajuste continuo muy aproximado a los datos discretos de la cadena FPU, y que además podía explicar la relación cuantitativa del tiempo de la recurrencia FPU con el tamaño del sistema N. Es decir, planteando que la recurrencia se debe a interacciones de solitones de la cadena (vistos desde este ajuste continuo), se observó que el tiempo de recurrencia cuadraba en buena medida y que la variación respecto de algunos parámetros se correspondía.

La aproximación parecía buena, pero describir un sistema discreto como uno continuo supone diferencias a nivel cualitativo. En aquellos años ya se hizo público el reporte original de Fermi, Pasta y Ulam, y la problemática captó la atención de la escuela japonesa quienes por su cuenta ya habían coqueteado con experimentos computacionales, pero con menor repercusión. El japonés M. Toda propuso un sistema integrable que es una cadena discreta no lineal conocida como red de Toda, cosa que de por sí tiene interés teórico para desbancar la intuición colectiva sobre los sistemas no lineales, pero que además sirvió como una mejor aproximación al comportamiento de la cadena FPU. Aunque de nuevo, no puede modelarse un sistema no integrable con otro integrable sin que haya diferencias cualitativas en el comportamiento.

En un trabajo de 1966 titulado "Statistical properties of a nonlinear string", F. M. Izrailev y B. V. Chirikov tratan de explicar el fenómeno de recurrencia FPU desde la perspectiva de la teoría KAM y proponen la idea de un 'umbral de estocasticidad', que consiste en un valor límite de energía en función del tamaño del sistema a partir del cual no aparece la recurrencia FPU y se tiene una rápida tendencia hacia la equipartición de la energía. Estos autores también conjeturaron que en el límite termodinámico $(N \to \infty \text{ para este caso})$ la recurrencia FPU desaparece. Esto quedaría probado si se cumpliese que $E_{umb}(N)/N$ tiende a 0 en el límite termodinámico, pero en 1971 aparece el artículo "Anharmonic chain with Lennard-Jones interaction" escrito por P. Bocchieri et al., y en este se realiza un estudio sobre una cadena con el potencial de Lennard-Jones para el que se encuentra un valor límite de la energía promedio

por partícula en el límite termodinámico. Esta es otra de las cuestiones abiertas acerca de la cadena FPU y en la que hay avances muy recientes.

Con el último artículo que hemos citado, la escuela italiana entra en escena. Un grupo de física teórica en Milán observaron la dependencia exponencial del espectro FPU (es decir, la representación de la energía del k-ésimo modo normal frente a k/N) y trataron de establecer alguna relación con la distribución de Planck. Esto se comenta de manera anecdótica, aunque puede verse varias referencias sobre el tema en [BCGG, 2008]. Años más tarde, en 1982, otro grupo de italianos que trabajaban en la 'theory of glasses' encabezado por Fucito, escribieron el artículo "Approach to equilibrium in a chain of nonlinear oscillators" en el que se estudia un sistema continuo unidimensional que presenta un primer estado aparentemente de equilibrio, pero que llegado a cierto punto evoluciona hacia otro estado finalmente estacionario. Esta idea es transportada a la cadena FPU una vez conocido el hecho de que este sistema alcanza la equipartición de la energía tras un largo tiempo, es decir, las recurrencias FPU serían este primer estado aparentemente estacionario, el cual se denomina metaestable.

Las ideas de Fucito et al. fueron desestimadas dentro del panorama FPU por muchos años. Estas fueron rescatadas alrededor el año 2000 por una serie de autores principalmente italianos. En 2004 apareció el artículo [BGG, 2004], en el que se vuelve a hablar en términos de un estado metaestable y se caracteriza por el paquete de modos en el que se encuentra la mayor parte de la energía del sistema y por el tiempo de formación de dicho estado. Dejaremos la historia del problema FPU en este punto, aunque en los resultados y conclusiones veremos algunas de las tesis que han ido surgiendo en estos últimos años.

1.2. Sistemas Hamiltonianos e Integrabilidad.

En esta sección se presenta la propiedad de integrabilidad de un sistema mecánico. Para comenzar, se revisa brevemente la formulación de la mecánica analítica y los conceptos de sistema lineal y de existencia de solución analítica. La integrabilidad exige introducir el espacio de fases de un sistema de EDO, y también el concepto de flujo asociado a una EDO. Tras esto, se explica lo que es la integrabilidad para los sistemas de EDO hamiltonianos y se distingue de la linealidad y de la existencia de una solución analítica. Finalmente, se discute la presencia de estas propiedades en la cadena FPU.

Formulaciones de la Mecánica Analítica

En mecánica analítica se tienen diversas formulaciones o métodos que permiten obtener las ecuaciones del movimiento de un sistema mecánico. A continuación veremos los métodos para obtener las ecuaciones del movimiento de las conocidas formulaciones de Lagrange y de Hamilton de la mecánica. Estas se basan en la existencia de una función lagrangiana L o de una función hamiltoniana H, que satisfacen ciertas ecuaciones obtenidas mediante el principio de mínima acción. La función lagrangiana depende de unas coordenadas generalizadas del sistema $q = (q_1, \ldots, q_N)$, de sus primeras derivadas $\dot{q} = (\dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_N)$, y del tiempo t. Para un sistema formado por un número finito de partículas y una función potencial U que dependa solo de las coordenadas q y del tiempo t, se tiene que la función lagrangiana es de la forma:

$$L(q, \dot{q}, t) = T(\dot{q}) - U(q, t),$$

donde T es la función de la energía cinética y puede obtenerse utilizando las transformaciones de las coordenadas q a coordenadas rectangulares. Las ecuaciones del movimiento, en este caso, se siguen de las ecuaciones de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0, \tag{1.3}$$

definidas para cada j = 1, ..., N. La fuerza generalizada sobre la coordenada generalizada q_j se define como $F_j = -\partial U/\partial q_j$. Esto permite ver que si las fuerzas vienen dadas por términos lineales respecto de las posiciones de las partículas, entonces las ecuaciones del movimiento forman un sistema de EDO lineal. Este tipo de sistemas mecánicos se dicen lineales y si además es conservativo como en nuestro caso, entonces las ecuaciones del movimiento son EDO autónomas y el sistema tiene solución.

Los sistemas mecánicos también tienen asociada una función hamiltoniana H, la cual depende de unas coordenadas generalizadas del sistema $q = (q_1, \ldots, q_N)$, de unos momentos generalizados $p = (p_1, \ldots, p_N)$

y del tiempo t. Dado j = 1, ..., N, se define el momento generalizado $p_j = \partial L/\partial \dot{q}_j$ asociado a la coordenada q_j . Utilizando este cambio de variables, la función hamiltoniana se define como:

$$H(q, p, t) = \sum_{j=1}^{N} p_j \dot{q}_j - L(q, p, t).$$

Conocida la función hamiltoniana de un sistema mecánico, sus ecuaciones del movimiento pueden deducirse a partir de las ecuaciones de Hamilton:

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \qquad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j},$$
(1.4)

definidas para cada j = 1, ..., N. La idea de resolver un sistema mecánico, desde el punto de vista de la mecánica analítica, consiste en encontrar la solución del sistema de EDO que forman sus ecuaciones del movimiento. Dado un sistema mecánico, si existe una función analítica que sea solución a sus ecuaciones del movimiento, se dirá que el sistema tiene solución analítica. Como ya hemos dicho, los sistemas lineales conservativos tienen solución y esta es una función analítica.

Sistemas de EDO Hamiltonianos

Con carácter más general, puede hablarse de aquella colección de sistemas de EDO de primer orden que pueden derivarse mediante las ecuaciones de Hamilton (1.4). Estos se conocen como sistemas hamiltonianos y generalizan el concepto de un sistema mecánico. Los resultados sobre sistemas hamiltonianos son aplicables a los sistemas mecánicos vía formulación de Hamilton. Pese a que la formulación hamiltoniana no simplifique el trabajo de resolver el sistema de EDO en comparación con la formulación de Lagrange, se considera un avance porque el estudio en abstracto de los sistemas hamiltonianos resulta fructífero, por ejemplo, con las ideas de geometría simpléctica que no introduciremos aquí.

Llamamos sistema de EDO hamiltoniano a todo sistema de EDO que se derive a partir de una función hamiltoniana H(q, p, t) y mediante las ecuaciones de Hamilton (1.4). Unas variables q_j, p_j que satisfacen las ecuaciones (1.4) se dicen variables conjugadas. Las soluciones de un sistema hamiltoniano serán funciones (q(t), p(t)), y se dice trayectoria asociada a cada una de estas soluciones a la curva descrita por la parametrización $\{(q(t), p(t)) \in \mathbb{R}^{2N} : t \in \mathbb{R}\}$. Usualmente las trayectorias se definen en \mathbb{R}^{2N} , siendo cada uno de estos puntos una de las posibles configuraciones de las variables dependientes q, p del sistema. El espacio \mathbb{R}^{2N} se conoce como el espacio de fases.

Para el caso particular en el que H no depende de la variable independiente t, las trayectorias de las soluciones cumplirán ciertas propiedades adicionales. Este tipo de sistemas se conocen como sistemas hamiltonianos conservativos, dado que los sistemas mecánicos entran en esta categoría si y solamente si son conservativos. Todo par de trayectorias distintas de un sistema hamiltoniano conservativo no se cortan. Una misma trayectoria puede venir dada por un par de soluciones distintas (q(t), p(t)) y $(\hat{q}(t), \hat{p}(t))$, pero en ese caso existirá una constante $\Delta t \in \mathbb{R}$ de tal modo que $(\hat{q}(t), \hat{p}(t)) = (q(t + \Delta t), p(t + \Delta t))$. Es decir, las soluciones que dan lugar a una misma trayectoria, son soluciones temporalmente desfasadas y viceversa. En vista de estas propiedades, puede definirse una familia de transformaciones del espacio de fases. Dado un sistema hamiltoniano conservativo, se define para cada $t_1 \in \mathbb{R}$ la siguiente aplicación:

$$\Phi_{t_1}: \mathbb{R}^{2N} \longrightarrow \mathbb{R}^{2N}$$
$$(q^{(0)}, p^{(0)}) \longmapsto (q(t_1), p(t_1))$$

donde (q(t), p(t)) es una solución al sistema que cumple que $(q(t), p(t)) = \Phi_t(q^{(0)}, p^{(0)})$. Es decir, la transformación Φ_{t_1} lleva cada estado del sistema (o punto de del espacio de fases) al estado único en que puede evolucionar pasado un tiempo t_1 . Este conjunto de transformaciones se dice flujo del sistema. Forman un grupo respecto de la composición de aplicaciones, siendo $\Phi_{t_2} \circ \Phi_{t_1} = \Phi_{t_{1+2}} \ y \ \Phi_{t_1}^{-1} = \Phi_{-t_1}$.

Integrabilidad de Sistemas Hamiltonianos

Consideremos el sistema hamiltoniano descrito por una función hamiltoniana H y que además es conservativo, es decir, se cumple que $\partial H/\partial t = 0$. El valor de la función H, si bien no es idénticamente constante,

sí que se mantiene constante respecto de la variable temporal y por lo tanto, tomará un valor constante para todos los puntos de la trayectoria asociada a una solución. Este tipo de magnitudes del sistema f = f(q, p) que no dependen del tiempo explícitamente se conocen como integrales del movimiento. La función hamiltoniana de la que se deriva un sistema hamiltoniano conservativo es una integral del movimiento. Si hablamos de sistemas mecánicos conservativos y ante una elección de coordenadas naturales del sistema, se tendrá que la función energía total del sistema coincide con la función hamiltoniana y es una integral del movimiento.

Nótese que, conocido el valor $f_0 = f(q(t_0), p(t_0))$ de una de estas funciones para la solución particular (q(t), p(t)), se tendrá una variedad geométrica del espacio de fases definida como el conjunto:

$$\{(q,p) \in \mathbb{R}^{2N} : f(q,p) - f_0 = 0\}.$$

Sucede que la trayectoria asociada a esta solución (q(t), p(t)) es un subconjunto de la variedad geométrica que define esta integral del movimiento. Si se conoce múltiples integrales del movimiento del sistema y los valores que estas toman para una solución particular determinada, ocurrirá que la trayectoria asociada a dicha solución esté contenida en la intersección de todas las variedades asociadas a dichos valores de las integrales del movimiento. La idea de integrabilidad de un sistema hamiltoniano consiste en la existencia de un conjunto de integrales del movimiento del sistema que sea suficiente para determinar cada trayectoria a partir de los valores que tomen estas integrales del movimiento, siendo la trayectoria la intersección de las variedades geométricas que definen este conjunto de integrales del movimiento.

Para dar una solución de un sistema integrable, basta con conocer unos valores iniciales de las coordenadas y de los momentos. Esto permite obtener los valores que toman las integrales del movimiento, y con estos se conoce la trayectoria en el espacio de fases. Con esto se tiene una solución que puede ser o no analítica. Los sistemas hamiltonianos conservativos que además son lineales pueden escribirse en forma matricial. La diagonalización de dicha matriz consiste en un cambio de coordenadas por el cual se obtiene un sistema de EDO con ecuaciones independientes. Cada una de estas ecuaciones es un sistema hamiltoniano. Cada una de estas funciones hamiltonianas de ecuaciones individuales es una integral del movimiento del sistema original, y de esto se sigue que los sistemas hamiltonianos conservativos lineales son siempre integrables. Las variables que se obtienen al aplicar este cambio de coordenadas se llaman coordenadas normales.

Integrabilidad en la Cadena FPU

El sistema estudiado por Fermi, Pasta y Ulam se plantea como un sistema lineal al que se añade una pequeña perturbación no lineal. El sistema lineal de referencia es la cadena de osciladores armónicos acoplados. Se trata de un sistema conservativo y lineal, por lo que admite solución analítica, es integrable, y además puede plantearse el citado cambio a coordenadas normales.

En la función hamiltoniana (1.1) de la cadena FPU, el sistema lineal se tiene haciendo nulos a α y β . Cada uno de estos parámetros aparece como factor de escala de un término no lineal. Se conoce como la cadena α -FPU al sistema con hamiltoniano (1.1) donde $\beta = 0$ y α es lo suficientemente pequeño como para que el término no lineal al que acompaña sea una pequeña perturbación al sistema lineal. De forma análoga puede hablarse de la cadena β -FPU. Para estos sistemas no existe, o no se conoce, una solución explícita a sus ecuaciones del movimiento. Además, la única integral del movimiento conocida para las cadenas α -FPU y β -FPU es la energía total del sistema. Las energías de los modos del sistema lineal dejan de ser integrales del movimiento al añadir la perturbación no lineal, dado que los modos comienzan a compartir energía entre ellos. En definitiva, la cadena FPU es un sistema no lineal y no integrable.

Algunos autores, como J. Ford y J. Waters en su artículo "Computer Studies of Energy Sharing and Ergodicity for Nonlinear Oscillator Systems" de 1963, atribuyen la no ergodicidad de la cadena FPU a la posible existencia de una o varias integrales del movimiento adicionales que expliquen este comportamiento de recurrencia. En particular, Ford y Waters calcularon numéricamente la expresión de una integral,¹ que es integral del movimiento para ciertos sistemas, en toda la trayectoria del sistema FPU,

 $^{^{1}}$ Se trata de una integral del movimiento calculada por Whittaker en su artículo "On the Adelphic Integral of the Differential Equations of Dynamics" de 1916.

obteniendo valores cercanos a una misma constante y a su criterio, lo suficientemente como para verse probada la existencia de otra integral del movimiento independiente de la energía total. En absoluto se trata de una prueba rigurosa, de hecho esta idea no ha marcado ninguna línea de investigación fructífera.

1.3. Equipartición de la Energía y Termalización.

Esta sección está dedicada a explicar los conceptos que se manejan en las hipótesis del experimento FPU, que son la ergodicidad de un sistema, la equipartición de la energía y la termalización. Veremos qué quiere decir cada uno de ellos, explicaremos brevemente cómo la mecánica estadística plantea que la cadena FPU deba tender hacia la equipartición de la energía y también relacionaremos el tiempo que tarda en darse la termalización con la entropía de Shannon, como una herramienta experimental.

Ergodicidad y Equipartición de la Energía

En primer lugar, debe discutirse la conexión entre la terminología de la mecánica clásica y la de la mecánica estadística. Cuando se trabaja con un sistema hamiltoniano conservativo, esencialmente se dispone de un espacio de fases y de una solución, que es una curva en el espacio de fases que se va recorriendo en función de una variable temporal. En mecánica estadística se tiene un conjunto de microestados del sistema que coincide con el espacio de fases, a cada punto del espacio de fases se le dice microestado y los microestados accesibles serían, para el caso de un sistema hamiltoniano, los puntos de una trayectoria particular del espacio de fases. La distinción es que en mecánica estadística se habla de macroestados, que vienen caracterizados por el valor de unas variables macroscópicas del sistema. Por ejemplo, la cadena FPU es un sistema aislado y por ello debe tratarse con el colectivo microcanónico. Las variables que caracterizan el estado del sistema en este caso serían la energía total del sistema E, el volumen V (que en este caso sería la longitud de la cuerda L y es fija) y el número de partículas N o tamaño del sistema.

La mecánica estadística no exige determinar la evolución de un sistema, más bien se basa en su comportamiento probabilista y para tal fin se introduce el promedio de una magnitud f(q, p) (nótese que fdependerá de t en la medida en que q = q(t), p = p(t) dependan de t). Se habla de dos tipos de promedio, el promedio temporal definido de la manera siguiente:

$$\overline{f}(q,p) = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(q(t), p(t)) dt$$

y el promedio colectivo, que se evalúa en el espacio de fases y es como suponer que se promedia sobre copias de un sistema concreto en microestados diferentes, es decir, sobre un colectivo de sistemas:

$$\langle f(q,p)\rangle = \int_{\mathbb{R}^{2N}} f(q,p) dq dp.$$

Se conoce como hipótesis ergódica a la suposición de que la probabilidad de encontrar al sistema en cualquier microestado de una región del espacio de fases sea proporcional al volumen de dicha región, de modo que todos los microestados aparecen con igual probabilidad y se tiene la equivalencia entre los promedios temporal y colectivo para cualquier magnitud de un sistema. Esta hipótesis permite formular el llamado teorema de la equipartición de la energía, que consiste en que un sistema ergódico dado por un hamiltoniano H(q, p) satisface las igualdades siguientes:

$$\left\langle q_j \frac{\partial H}{\partial q_k} \right\rangle = \delta_{j,k} k_B \tau, \qquad \left\langle p_j \frac{\partial H}{\partial p_k} \right\rangle = \delta_{j,k} k_B \tau, \qquad \left\langle p_j \frac{\partial H}{\partial q_k} \right\rangle = 0 = \left\langle q_j \frac{\partial H}{\partial p_k} \right\rangle,$$

para cualesquiera j, k = 1, ..., N, donde $\delta_{j,k}$ es la delta de Kronecker, k_B es la constante de Boltzmann y τ es la temperatura del sistema. Apliquemos este resultado a la cadena FPU. Tomamos la parte lineal del hamiltoniano (1.2) para los modos normales y calculamos las cantidades siguientes para cada r = 1, ..., N:

$$\left\langle \eta_r \frac{\partial H}{\partial \eta_r} \right\rangle = 2 \left\langle U_r \right\rangle, \qquad \left\langle \sigma_r \frac{\partial H}{\partial \sigma_r} \right\rangle = 2 \left\langle T_r \right\rangle,$$

donde U_j y T_j representan las energías potencial y cinética del *r*-ésimo modo normal, respectivamente. El caso lineal es claramente no ergódico porque las energías totales de los modos son constantes y no necesariamente iguales. Ahora vemos qué ocurre con la cadena α -FPU, es decir, tomamos el hamiltoniano (1.2) con $\beta = 0$ y calculamos la siguiente cantidad para cada $r = 1, \ldots, N$:

$$\left\langle \eta_r \frac{\partial H}{\partial \eta_r} \right\rangle = 2 \left\langle U_k \right\rangle + \alpha \left\langle \sum_{j,l=1}^n (\gamma_{k,j,l} + \gamma_{j,k,l} + \gamma_{j,l,k}) \eta_j \eta_l + 2 \sum_{j=1}^n (\gamma_{k,k,j} + \gamma_{k,j,k} + \gamma_{j,k,k}) \eta_k \eta_j + 3 \gamma_{k,k,k} \eta_k^2 \right\rangle.$$

Si suponemos que la cadena α -FPU es un sistema ergódico, el resultado es que se tiene la equipartición de la energía entre los modos. Además, en el límite $\alpha \to 0^2$ se tiene que cada $\langle E_r \rangle$ tiende a $k_B \tau$. Lo sorprendente del descubrimiento de Fermi, Pasta y Ulam es que observaron un sistema no lineal que no presenta equipartición de la energía, y que entonces no puede ser ergódico. Nótese además que en el propio trabajo [FPU, 1955] se muestra los valores promedio de las energías cinéticas de los modos más bajos y que estos tienden hacia unos valores constantes que no son los de la equipartición, se trata de una configuración diferente. Téngase en consideración lo siguiente: a día de hoy se conoce que la cadena FPU termaliza (es decir, alcanza la equipartición de la energía entre los modos) después de un largo tiempo, pero hasta entonces se observa que el comportamiento del sistema no es ergódico y por eso se concluye que la no linealidad no implica la ergodicidad del sistema, sin entrar a valorar si finalmente deba darse o no la equipartición de la energía en cualquier sistema no lineal.

Termalización y Entropía

En la subsección previa se discutió que la cadena FPU es ergódica en el límite $\alpha, \beta \rightarrow 0$ pero que el experimento FPU mostró que se alcanza una configuración diferente de la equipartición de la energía. Lo que Fermi, Pasta y Ulam no sabían es que, de hecho, la cadena sí alcanza la equipartición de la energía tras un tiempo muy elevado. Dicho tiempo se llama tiempo de termalización y veremos como utilizar la función de entropía de Shannon para medirlo. Este concepto viene de la llamada teoría de la información iniciada por Shannon en su artículo [Shannon, 1948].

La teoría de la información trata de resolver la cuestión de hallar la cantidad mínima de información para transmitir un mensaje. Supongamos que un receptor espera recibir un mensaje de la lista $\{0, 1, 2, 3\}$. Cada uno de los posibles mensajes puede asignarse de manera única a una cadena de dos elementos del conjunto $\{0, 1\}$, por ejemplo, $0 \equiv 00, 1 \equiv 01, 2 \equiv 10$ y $3 \equiv 11$. En este caso se dirá que la información mínima necesaria para transmitir el mensaje es de 2 unidades binarias o bits. Esta será la cantidad de información asociada a cada mensaje, y es la misma para 0, 1, 2 y 3 dado que, en principio, la probabilidad de recibir uno u otro mensaje es la misma. Podemos generalizar este proceso al caso de una lista finita de sucesos probables $\{A_1, \ldots, A_m\}$ con probabilidades asociadas $\hat{p}_1, \ldots, \hat{p}_m$, es decir, $\hat{p}_1 + \ldots + \hat{p}_m = 1$ y $0 \leq \hat{p}_j \leq 1$ para $j = 1, \ldots, m$. Si llamamos I a la función de información del ejemplo anterior, se tiene que $I(x) = 2 = -\log_2(1/4)$ para cualquier $x \in \{0, 1, 2, 3\}$ y notemos que si estos mensajes se suponen equiprobables, la probabilidad asociada a cada uno de ellos es 1/4. Entonces, regresando a la construcción abstracta, podemos definir la función de información sobre este espacio de sucesos finito como:

$$I(A_j) = -\log_2(\hat{p}_j),$$

para cada $j = 1, \ldots, m$. Esta función de información coincide con la cantidad de información necesaria para representar cada mensaje en el ejemplo concreto que vimos, y esto es así porque se trataba de una lista de eventos equiprobables. En general no tiene sentido buscar una interpretación a la cantidad de información de un mensaje, dado que el problema que se plantea es el de cuantificar la cantidad de información necesaria que debe conocer un receptor para poder determinar el mensaje que se quiere transmitir. Entonces, ante una lista finita de mensajes posibles $\{A_1, \ldots, A_m\}$, podemos plantear una función que cuantifique la cantidad de información necesaria que se debe recibir para poder determinar qué mensaje de entre todos ellos es el que se quiere transmitir. La respuesta dependerá de las probabilidades $\hat{p}_1, \ldots, \hat{p}_m$ asociadas a cada uno de los mensajes. Si un mensaje es seguro, entonces la cantidad de información necesaria para transmitirlo será 0. Por su parte, los mensajes improbables tienen asociada

²Aquí no nos referimos al sistema límite, que es el sistema lineal y nada tiene que var con la equipartición de la energía. Hablamos de los sistemas α -FPU en los que el parámetro α es no nulo y tan pequeño como se desee.

9

una información infinita, que significa que en el límite en que el suceso de querer transmitir este mensaje se hace altamente improbable, la cantidad de información que debería transmitirse tiende a infinito. Se define la entropía de la información como la media de las informaciones de los sucesos ponderada con sus probabilidades, es decir:

$$\mathcal{H}(\hat{p}_1,\ldots,\hat{p}_m) = -\sum_{j=1}^m \hat{p}_j \log_2(\hat{p}_j).$$

Esta función es la que nos dice la cantidad de información que se necesita transmitir para que un receptor pueda conocer el mensaje. La idea está clara en el caso en el que todos los mensajes aparecen con la misma frecuencia, pero para el caso general, la frase anterior solo tiene sentido si se considera el algoritmo de Huffman (véase [Huffman, 1952]), el cual asigna de manera óptima una codificación en bit (en realidad, con una numeración en cualquier base) a cada mensaje dependiendo de su probabilidad asociada. Los mensajes más probables tendrán asignadas cadenas más cortas de bit y en promedio, la cantidad de información que necesita transmitirse será la entropía de la información. Notemos algunas propiedades de esta definición. Si todos los mensajes son equiprobables $(\hat{p}_1 = \ldots = \hat{p}_m = 1/m)$, entonces $\mathcal{H}(1/m, \ldots, 1/m) = \log_2(m)$. Este es el caso en el que se requiere transmitir una mayor cantidad de información, dado que todos los sucesos tienen la misma probabilidad. Los casos opuestos serían aquellos en los que uno de los sucesos sea seguro y entonces se tiene que $\mathcal{H}(1, 0, \ldots, 0) = 0$. Es decir, la función entropía de Shannon \mathcal{H} es siempre no negativa y además queda acotada entre 0 y $\log_2(m)$. Por último, observemos que lo relevante de esta función es que sea logarítmica, y no la base del logaritmo. Se ha utilizado base 2 dado que el primer ejemplo utiliza una cadena de bit, pero con todo derecho puede utilizarse cualquier otra base. El paso de base 2 a una base *b* se hace multiplicando por $\log_b(2)$.

Después de esta presentación, particularicemos al caso que nos ocupa. En el sistema de la cadena FPU nos interesará una lista de N modos normales y sus energías promedio. Si se tiene la equipartición de la energía, entonces $\langle E_1 \rangle = \ldots = \langle E_N \rangle = E/N$. Podemos considerar los 'mensajes' { η_1, \ldots, η_N } y sus 'probabilidades asociadas' { $\langle E_1 \rangle / E, \ldots, \langle E_N \rangle / E$ }. De este modo, la función entropía H se hará máxima al aproximarse a la equipartición de la energía y será nula en el estado inicial en el que solo se excite el modo fundamental. En la práctica usaremos la función S siguiente, derivada a partir de \mathcal{H} :

$$S(\langle E_1 \rangle, \dots, \langle E_N \rangle) = 1 + \frac{1}{\ln(N)} \sum_{r=1}^{N} \frac{\langle E_r \rangle}{E} \ln\left(\frac{\langle E_r \rangle}{E}\right).$$
(1.5)

Es conveniente reformular la función de esta manera, ya que esta nueva función S tomará valores entre 0 y 1, pero se comportará cualitativamente igual que $-\mathcal{H}$, alcanzando el valor 0 en la equipartición de la energía y pudiendo establecer el criterio para la equipartición de la energía en un valor arbitrario de cercanía a 0 que resulta intuitivo, por ejemplo, 0,001.

1.4. Modulación de la Cadena FPU y el Estado Metaestable.

En esta sección revisaremos algunos de los avances que se conocen sobre la cadena FPU, todos ellos ligados a la idea original de Zabusky de aproximar o de modular la cadena FPU con la ecuación de un modelo continuo, integrable y no lineal. Comenzaremos por ver el origen de este modelo continuo, la ecuación KdV, y hablaremos de los primeros trabajos que surgieron para explicar cualitativamente el comportamiento de los periodos de la recurrencia FPU, los cuales se deben fundamentalmente a Zabusky y a Toda. Después, veremos que esta idea de aproximar la cadena FPU con un modelo continuo e integrable permite explicar parte de la fenomenología conocida acerca de la cadena FPU cuando exhibe recurrencia. Es conocido que la cadena FPU alcanza un primer macroestado que se caracteriza por la recurrencia FPU y que se mantiene por un tiempo relativamente largo antes de evolucionar hacia otro macroestado en el que sí se alcanza la equipartición de la energía. Este primer macroestado no es estacionario, y por eso suele referirse a este como el estado metaestable de la cadena FPU.

La Ecuación KdV

En 1844, J. S. Russel escribió, en su afamado *"Report on Waves"* presentado en la decimocuarta reunión de la *British Association for the Advancement of Science*, la siguiente descripción sobre un curioso fenómeno

que presenció:³

«I was observing the motion of a boat which was rapidly drawn along a narrow channel by a pair of horses, when the boat suddenly stopped - not so the mass of water in the channel which it had put in motion; it accumulated round the prow of the vessel in a state of violent agitation, then suddenly leaving it behind, rolled forward with great velocity, assuming the form of a large solitary elevation, a rounded, smooth and well-defined heap of water, which continued its course along the channel apparently without change of form or diminution of speed. I followed it on horseback, and overtook it still rolling on at a rate of some eight or nine miles an hour, preserving its original figure some thirty feet long and a foot to a foot and a half in height. Its height gradually diminished, and after a chase of one or two miles I lost it in the windings of the channel. Such, in the month of August 1834, was my first chance interview with that singular and beautiful phenomenon which I have called the Wave of Translation».

Russel observó una 'onda de traslación' en el agua de un canal estrecho y poco profundo que se propagaba, aparentemente, sin variar su perfil y sin perder velocidad durante un largo tiempo. Él mismo llevó a cabo experimentos para tratar de arrojar luz sobre este fenómeno y tras él, otros investigadores como Rayleigh y Boussinesq. No fue hasta 1895 que Korteweg y de Vries fueron capaces de modelar este fenómeno con la ecuación en derivadas parciales que lleva su nombre:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 6u \frac{\partial u}{\partial x},$$

donde u = u(x, t) es la función que describe el perfil de la onda en función del tiempo. Años más tarde, esta ecuación daría mucho de que hablar por las propiedades características que presentan sus soluciones.

Solitones y Red de Toda para Explicar la Recurrencia FPU

Tras el artículo inicial de Zabusky y Kruskal de 1965, Zabusky trató de aproximar la cadena FPU con este modelo continuo. Es decir, se dio cuenta de que en el límite $N \to \infty$, la cadena α -FPU tiende al modelo continuo de la ecuación KdV (para la cadena β -FPU existe la llamada ecuación KdV modificada), en el sentido de que las elongaciones q_j de las partículas respecto de sus posiciones de equilibrio se aproximan al perfil de alguna solución de la ecuación KdV. Estas soluciones se conocen como solitones, y de forma más general puede llamarse así a las soluciones de una EDP no lineal que cumplan que su forma permanece igual en el tiempo, que son soluciones localizadas, y que un par de estas soluciones interaccionan sin cambiar su forma.⁴ Uno de los resultados de Zabusky, basado en la aproximación de la cadena α -FPU por la ecuación KdV, es la siguiente estimación del periodo de la recurrencia FPU:

$$T_{FPU} = \frac{3}{\pi^{3/2}\sqrt{2}} \frac{N^{3/2}}{\sqrt{a\alpha}} T_1 \approx 0.38 \frac{N^{5/2}}{\sqrt{a\alpha}},\tag{1.6}$$

donde el estado inicial es el modo fundamental con una amplitud $a = |\eta_1|$, T_1 es el periodo de oscilación del modo fundamental y la aproximación de la derecha se sigue de $T_1 \approx 2N$ para $N \gg 1.5$ Obviamente, aproximar un sistema discreto a partir de un modelo continuo conlleva imprecisiones. El japonés M. Toda diseñó un modelo de cadena integrable que plasmó en su trabajo "Vibration of a chain with a non-linear interaction" de 1967. Se dio cuenta de que su modelo tenía soluciones que son solitones y con ello trato de aproximar a la cadena FPU, obteniendo la siguiente corrección al tiempo de recurrencia FPU de Zabuski:

$$T_{FPU} \approx 0.31 \frac{N^{5/2}}{\sqrt{a\alpha}}.$$
(1.7)

De nuevo, aproximar un sistema no integrable a partir de otro que sí que es integrable implica diferencias en el comportamiento cualitativo observado. Sin embargo, parece que la cadena FPU se comporta como un sistema integrable mientras permanece en el estado metaestable, de manera que la diferencia cualitativa parece ser únicamente que la red de Toda no alcanza la equipartición de la energía.

³Texto sacado de http://www.ma.hw.ac.uk/~chris/scott_russell.html.

⁴Véase P. G. Drazin, R. S. Johnson, "Solitons: an introduction", 2da edición, p.15, 1989.

⁵Esta aproximación se basa en que en ω_1 tomada de (2.11) puede aproximarse el seno por su argumento y también $N \approx N + 1$ cuando N es grande.

Aspectos Cualitativos del Estado Metaestable Dados por la Modulación de la Cadena FPU

El trabajo de 1982 de Fucito y colaboradores, pese a que pasó muchos años desapercibido en la comunidad que estudiaba la cadena FPU, alcanzó notoriedad en este campo a principios de este siglo. El artículo muestra un sistema no lineal y continuo en el que inicialmente se tiene un comportamiento concreto, pero que con el tiempo, la aparición de singularidades en el plano complejo que se van aproximando a la recta real supone el cambio más o menos brusco de dicho comportamiento. Una idea física de su resultado, que es el punto relevante de su trabajo, es que este sistema alcanza un primer estado aparentemente de equilibrio, pero que súbitamente (en el sentido de que no pasa nada sustancial en los valores reales del modelo) aparece un mecanismo que lo hace evolucionar hacia un estado finalmente estacionario. Ese primer estado se dice metaestable, y esta idea se transporta a la cadena FPU en cuanto a que inicialmente se forma un aparente estado estacionario que exhibe una casi recurrencia de estados (microestados), pero que pasado un tiempo evoluciona hacia la equipartición de la energía.

Durante la década de los 2000 esta idea del estado metaestable en la cadena FPU apareció en multitud de publicaciones, principalmente a cargo de autores italianos. La idea de Zabusky de aproximar la cadena α -FPU por un modelo continuo tuvo cierta justificación teórica a partir de esta etapa.⁶ La idea principal es que la cadena FPU en su estado metaestable se comporta como si se tratase de una señal discreta modulada por la ecuación no lineal de algún modelo integrable, como es el caso de la cadena α -FPU con las ecuaciones KdV, o la β-FPU con las ecuaciones MKdV (KdV modificadas). El uso del término modulación (propio del tratamiento de señales) en lugar de aproximación se relaciona con el hecho de que los modos normales de la cadena FPU con condiciones de contorno periódicas vienen dadas por la transformada discreta de Fourier. Esta relación entre el estado metaestable de la cadena FPU y ciertos modelos integrables ha resultado en multitud de trabajos que justifican algunas de las relaciones cualitativas sobre el comportamiento de los sistemas FPU, siendo algunas de ellas encontradas previamente por otros autores de manera experimental. A continuación, hablaremos sobre algunos de estos resultados para la cadena α -FPU, válidos tan solo cuando el estado inicial tiene toda su energía en el modo fundamental. Durante la década de 1970 ya se advirtió sobre la relación exponencial que describía el espectro FPU (esto es, las energías promedio de cada modo frente a r/N), y sobre su posible conexión con la distribución de Planck (véase el trabajo citado de Bocchieri et al. de 1971). En [PoBa, 2005] se calcula la siguiente cota aproximada utilizando las ecuaciones KdV asociadas a la cadena α -FPU:

$$\frac{\overline{E}_r}{E} \le C_1 exp\left(-C_2 \frac{r}{N\epsilon^{1/4}}\right),\tag{1.8}$$

donde C_1 y C_2 son un par de constantes positivas, $\epsilon = E/N$ se dice la energía específica y E_r es la energía asociada al *r*-ésimo modo normal. Antes de ver el siguiente resultado, consideremos lo siguiente. Supongamos un estado inicial dado únicamente por el modo fundamental. Entonces el estado inicial de la ecuación KdV que modela a la cadena α -FPU es una función seno. Denotemos por u(x,t) la solución de la ecuación KdV que cumple la condición inicial que hemos dicho. Según la ecuación KdV, con el paso del tiempo los puntos se desplazan en la coordenada espacial hacia un lado. Ocurre que los puntos con un mayor valor de u(x,t) lo hacen algo más rápido y que llega a formarse una función con 'pared', es decir con un salto de valores discontinuo. Esto se conoce como shock wave en inglés y lo traducimos como onda de choque. Sucede que la formación del estado metaestable, es decir, la llegada al punto en el que las magnitudes macroscópicas se estabilizan (los promedios de las energías de los modos en nuestro caso), tiene lugar pasado un tiempo característico que denotaremos como t_{meta} . En [LoPa, 2006] se muestra una correspondencia clara entre el tiempo de formación de esta onda de choque y el tiempo de formación del estado metaestable, v se calcula la siguiente relación cualitativa:

$$t_{meta} = C_{meta} (N \epsilon^{-1/2} + \epsilon^{-3/4}), \tag{1.9}$$

donde C_{meta} es alguna constante real positiva. Recordemos también que el experimento FPU original muestra que la energía del sistema queda confinada entre los modos de frecuencias más bajas. El artículo [BGG, 2004] fue pionero en hablar y caracterizar este paquete de frecuencias ligadas a los modos que

 $^{^{6}}$ Nos referimos al trabajo [BaPo, 2005], que si bien no se trata de la referencia original que da cuenta de este hecho, sí que contiene una presentación asequible del tema.

contienen casi toda la energía del sistema durante la recurrencia. Volviendo a [LoPa, 2006], ahí se deriva otra relación cualitativa para la frecuencia de corte del paquete ω_{lim} .

$$\omega_{lim} = C_{lim} \epsilon^{1/4}, \tag{1.10}$$

donde C_{lim} es alguna constante positiva. Para finalizar, añadimos un resultado sobre la destrucción de este estado metaestable. Se trata del tiempo de termalización t_{term} de la cadena α -FPU, y lo encontramos en [OVPL, 2014].

$$t_{term} = C_{term} \epsilon^{-8}, \tag{1.11}$$

donde C_{term} es alguna constante positiva. Esta relación cuantitativa se deduce de aplicar la teoría de perturbaciones a la cadena α -FPU. En particular se encuentra que las interacciones a seis ondas son las interacciones de orden más bajo que suponen un proceso irreversible en la cadena, y se hacen significativas tras un tiempo muy elevado, coincidiendo con los tiempos de termalización del sistema que se estudia.

Observemos que las relaciones cualitativas únicamente corresponden al caso de la cadena α -FPU y de un estado inicial que consista en tan solo el primer modo fundamental excitado. Bajo estos supuestos, el hamiltoniano (1.1) dependerá únicamente de los parámetros m, κ, α, N y la colección de estados iniciales dados se caracteriza por el valor de la energía E. Es comúnmente aceptado que los parámetros m y κ son redundantes, en el sentido de que al cambiar sus valores pueden cambiarse los del resto de parámetros para obtener un sistema que se comporte cuantitativamente igual que el original. Nosotros probaremos precisamente que el parámetro E es redundante con α , o con β en el caso de la cadena β -FPU. Así no es de extrañar que todos los resultados anteriores involucren únicamente los parámetros E y N. Además, utilizamos la energía específica ϵ , que es la energía promedio de los modos cuando se tiene la equipartición, para enfatizar que estos resultados dicen algo coherente cuando se toma el límite termodinámico. Realmente se desconoce si se mantiene la recurrencia o no en el límite termodinámico, este es un problema abierto sobre la cadena FPU.

Modulación en la Cadena β -FPU y la Aparición de Caos

En este apartado queremos mostrar otro ejemplo de aplicación de la idea de Zabusky. En 1998, un grupo de investigadores encabezado por T. Cretegny publican un artículo titulado "Localization and equipartition of energy in the β -FPU chain: Chaotic breathers", en el cual se estudia la cadena β -FPU pero utilizando como estado inicial el modo de mayor frecuencia fundamental. La tesis principal que sostienen es que al modular la cadena con la ecuación de cierto modelo continuo aparecen, de entre las soluciones conocidas como breathers, unas soluciones que catalogan como chaotic breathers y que aparecen en la cadena β -FPU cuando esta exhibe un comportamiento caótico. Es decir, la idea de que el estado metaestable se pueda aproximar por un modelo continuo lleva de nuevo a conclusiones, o como mínimo a correlaciones, que pueden sugerir cierto mecanismo físico para según que fenómenos de la cadena FPU.

1.5. Objetivos.

Este trabajo tiene dos objetivos fundamentales. Uno de ellos es proveer al lector recién iniciado en el tema de una guía sencilla para entender los conceptos principales, así como de un contexto histórico y algo de la bibliografía básica. Este y los dos capítulos siguientes se escriben con esta finalidad. El otro objetivo consiste en reproducir parte de la fenomenología básica que se conoce a día de hoy sobre la cadena FPU, y a esto dedicaremos el capítulo de resultados. En resumidas cuentas, lo que allí haremos es:

- Explicar y ejemplificar el uso de herramientas experimentales para determinar tiempos característicos y otras magnitudes que caracterizan el comportamiento de la cadena FPU. Estas herramientas son la ya introducida entropía S (1.5), el espectro FPU y la representación de paquetes de energía.
- Evaluar la bondad de las leyes cualitativas citadas en este capítulo y también obtener alguna ley cualitativa en los casos en los que tal cosa resulte evidente.
- Entender que las magnitudes $\alpha^2 E$ y βE sirven para caracterizar a sistemas α -FPU y β -FPU que se comportan cuantitativamente igual salvo reescalamiento de las energías.

Capítulo 2 Cadena FPU.

En este capítulo se deducen las ecuaciones para la cadena FPU y los modos normales con todo detalle. La primera sección está dedicada al sistema FPU en general. En ella veremos el planteamiento del sistema, las ecuaciones del movimiento y la energía total. También se considerará el caso con condiciones de contorno periódicas. En la segunda parte, se trabajará la solución del sistema lineal asociado a las cadenas FPU. Se introducirán los modos normales con sus respectivas energías, y se indicarán las transformaciones entre estos y las coordenadas del sistema.

El capítulo está motivado por el sistema físico descrito en [FPU, 1955]. El análisis del sistema es elemental y puede consultarse las nociones y procedimientos en manuales básicos como [LaLi, 1978]. El cálculo de valores y vectores propios se apoya en [Elliot, 1953] y [Lara, 2001].

2.1. Sistema de la Cadena FPU.

En el trabajo original de Fermi, Pasta y Ulam se estudia un sistema de osciladores armónicos acoplados junto con una pequeña perturbación de tipo cuadrática o cúbica en las fuerzas, dadas en función de un parámetro α o β , respectivamente. Este sistema se conoce como la cadena FPU, y se distingue ambos casos como el α -FPU y el β -FPU. A continuación, se obtendrá la formulación de las ecuaciones del movimiento y de las energías de estos sistemas, y también para el caso con condiciones de contorno periódicas.



Figura 2.1: Se muestra de manera esquemática el sistema de la cadena FPU y se especifican algunas de las constantes y coordenadas.

Coordenadas del Sistema y Fuerzas de Interacción

La cadena FPU consiste en N+2 partículas, con la misma masa m todas ellas, y distribuidas a lo largo de un segmento de longitud L. Las partículas de los extremos de la cadena se mantienen fijas sus posiciones, de modo que el sistema cuenta con N grados de libertad. El movimiento de las partículas es longitudinal y queda restringido al segmento. Las masas solo interaccionan con otras masas adyacentes, como si se hallasen unidas por un muelle, y además se desprecia la interacción gravitatoria entre todas las masas. Nótese que este sistema, en el límite cuando N tiende a infinito, se trata del sistema de una cuerda vibrante continua y de extremos fijos.

Las interacciones entre cada par de partículas dependerán de la distancia relativa entre estas. Además, el sistema se encontrará en equilibrio únicamente cuando las partículas estén uniformemente distribuidas

en el segmento y su velocidad sea nula. En tal caso, d = L/(N+1) es la separación entre partículas. Para mantener la integridad de la cuerda, si la separación entre dos masas es mayor que d, la fuerza que estas se ejercen será atractiva. En cambio, si la separación es menor que d, la fuerza será repulsiva.

Se dice x_j a la coordenada de posición de la *j*-ésima partícula, que será una función dependiente del tiempo *t*. La derivada temporal de una función cualquiera f = f(t) se denotará por \dot{f} . Se utilizará un sistema de referencia tal que la posición de equilibrio de la *j*-ésima partícula sea $x_{j_0} = jd$. Para trabajar de forma más cómoda, se define el siguiente conjunto de coordenadas generalizadas:

$$q_j = x_j - x_{j_0}$$

para cada j = 1, ..., N. Estas coordenadas toman los valores $q_{j_0} = 0$ en la posición de equilibrio, y además se cumple que $\dot{q}_j = \dot{x}_j$ para j = 1, ..., N. Entonces el estado de equilibrio del sistema viene dado por $q_{j_0} = 0$, $\dot{q}_{j_0} = 0$. Se introduce la notación $q = (q_1, ..., q_N)$, $\dot{q} = (\dot{q}_1, ..., \dot{q}_N)$. También se introduce, como notación particular de este caso, que $q_0 = 0$ y $q_{N+1} = 0$, que hacen las veces de coordenadas generalizadas para las partículas de los extremos de la cuerda, pero que no deben confundirse con verdaderas coordenadas generalizadas del sistema. La disposición de los elementos del sistema puede verse en la figura 2.1.

Nótese que en este punto, el sistema mecánico ha sido descrito completamente salvo en la magnitud de las interacciones entre partículas. Llámese $F_{j,k}$ a la fuerza que sufre la *j*-ésima partícula por su interacción con la *k*-ésima partícula, siendo k = j - 1, j + 1 y j = 1, ..., N. Dicha fuerza depende de la posición relativa entre las partículas y se anula cuando dicha separación es *d*. Se tiene dicha separación cuando $q_j - q_k = 0$, por lo que si se escribe como una función $F_{j,k} = F_{j,k}(q_j - q_k)$, entonces $F_{j,k}(0) = 0$. Si además se asume que sea una función analítica, puede escribirse como una serie de potencias:

$$F_{j,k}(q_j - q_k) = F_{j,k}(0) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n F_{j,k}}{d(q_j - q_k)^n} (0) (q_j - q_k)^n.$$
(2.1)

De este modo, la aproximación que toma solo el término lineal es el caso de un sistema de osciladores armónicos acoplados, para el cual existe solución analítica y se verá en la sección siguiente. Ahora se trata de dar la expresión de la fuerza total que experimenta la *j*-ésima partícula. Llámese F_j . Se toma la aproximación con los tres primeros términos no nulos de la ecuación (2.1), que es suficiente para describir a las cadenas α -FPU y β -FPU. Considerando el comportamiento cualitativo de las interacciones, puede deducirse el signo de la constante $\kappa = [d(F_{j,k})/d(q_j - q_k)](0)$. Si k = j - 1, la separación entre partículas es $x_j - x_{j-1} = d + (q_j - q_{j-1})$ luego para valores positivos de $q_j - q_{j-1}$, la separación es mayor que d y la fuerza es atractiva, es decir, x_j experimenta una fuerza en sentido negativo del eje X. Si en cambio k = j + 1, la separación entre partículas es $x_{j+1} - x_j = d - (q_j - q_{j+1})$ y la fuerza es repulsiva, pero en este caso x_j también experimenta una fuerza en sentido negativo del eje X. En conclusión, κ es negativo y la fuerza total es la suma $F_j = F_{j,j-1} + F_{j,j+1}$, que dada de manera explícita es:

$$F_{j}(q_{1},\ldots,q_{N}) = -\kappa(2q_{j}-q_{j+1}-q_{j-1}) - \alpha\left[(q_{j}-q_{j-1})^{2} - (q_{j+1}-q_{j})^{2}\right] - \beta\left[(q_{j}-q_{j-1})^{3} - (q_{j+1}-q_{j})^{3}\right],$$
(2.2)

donde $\alpha = -[d^2(F_{j,k})/d(q_j - q_k)^2](0)$ y $\beta = -[d^3(F_{j,k})/d(q_j - q_k)^3](0)$. El sistema de la cadena α -FPU viene dado por $\beta = 0$ y α tal que el término asociado a él es pequeño en comparación al término lineal, el de κ . La cadena β -FPU tiene $\alpha = 0$ y β pequeño en relación con el mismo criterio. Nótese que la expresión (2.2) es la fuerza sobre la *j*-ésima partícula, que es la fuerza sobre su coordenada de posición x_j . En este caso, F_j es también la fuerza generalizada sobre la coordenada q_j por la relación siguiente:

$$F_j = -\frac{\partial U}{\partial x_j} = -\frac{\partial U}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial U}{\partial q_j},$$
(2.3)

donde U denota a la energía potencial del sistema.

Ecuaciones del Movimiento

En este apartado, se va a obtener las ecuaciones del movimiento del sistema por medio de la formulación lagrangiana. En primer lugar, se calcula la energía cinética. Esta se deduce fácilmente de las ecuaciones

 $\dot{x}_j = \dot{q}_j$, obteniéndose que:

$$T(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N) = \frac{m}{2} \sum_{k=1}^N \dot{q}_k^2,$$
(2.4)

y que puede escribirse en forma matricial como $\dot{q}^T \mathcal{M}_T \dot{q}$, con $\mathcal{M}_T = \frac{m}{2} I d_N$, donde $I d_N$ la matriz identidad de orden N. Como notación para los productos matriciales, se asumirá que los vectores sean vectores columna pese a que se definan como vectores fila. Para encontrar la función U de la energía potencial, se va a utilizar las ecuaciones (2.2) y (2.3). Como esta función es única salvo una constante aditiva, por comodidad se impone que tome el valor nulo en la posición de equilibrio y entonces queda de la siguiente manera:

$$U(q_1, \dots, q_N) = \frac{\kappa}{2} \sum_{k=1}^{N+1} (q_k - q_{k-1})^2 + \frac{\alpha}{3} \sum_{k=1}^{N+1} (q_k - q_{k-1})^3 + \frac{\beta}{4} \sum_{k=1}^{N+1} (q_k - q_{k-1})^4.$$
(2.5)

Conocidas las energías cinética (2.4) y potencial (2.5) del sistema, puede armarse la función lagrangiana $L(q, \dot{q}) = T(\dot{q}) - U(q)$. Utilizando las ecuaciones de Euler-Lagrange (1.3), la ecuación del movimiento para la *j*-ésima coordenada resulta ser:

$$m\ddot{q}_{j} = -\kappa(2q_{j} - q_{j+1} - q_{j-1}) - \alpha \left[(q_{j} - q_{j-1})^{2} - (q_{j+1} - q_{j})^{2} \right] - \beta \left[(q_{j} - q_{j-1})^{3} - (q_{j+1} - q_{j})^{3} \right].$$
(2.6)

Estas ecuaciones forman un sistema de EDO de orden 2 autónomo que no se sabe resolver analíticamente salvo para el caso armónico ($\alpha = \beta = 0$). Esta formulación de las ecuaciones del movimiento será útil en la sección siguiente, para resolver el caso armónico y definir unas coordenadas normales del sistema. No obstante, la formulación hamiltoniana que veremos a continuación será mejor de cara a los métodos de simulación.

Energía del Sistema

Para obtener las ecuaciones del movimiento del sistema, puede utilizarse la función hamiltoniana en lugar de la lagrangiana. Esta se escribe en función de las coordenadas q y de los llamados momentos generalizados, que se definen como $p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = m \dot{q}_j$. Con esto, la función hamiltoniana se define a partir de la lagrangiana como $H = \sum_j p_j \dot{q}_j - L$ y quedaría así:

$$H(q,p) = \frac{1}{2m} \sum_{k=1}^{N} p_k^2 + \frac{\kappa}{2} \sum_{k=1}^{N+1} (q_k - q_{k-1})^2 + \frac{\alpha}{3} \sum_{k=1}^{N+1} (q_k - q_{k-1})^3 + \frac{\beta}{4} \sum_{k=1}^{N+1} (q_k - q_{k-1})^4.$$
(2.7)

Sustituyendo p por $m\dot{q}$, es evidente que $\sum_j p_j \dot{q} = 2T$ para este sistema. Por lo tanto, la función hamiltoniana y la función energía total E son la misma y se tiene un sistema con coordenadas naturales. Como la función hamiltoniana no depende explícitamente del tiempo, es decir, se cumple que $\partial H/\partial t = 0$, ocurre que la energía total del sistema es una integral del movimiento.

Utilizando la función hamiltoniana junto con las ecuaciones de Hamilton (1.4), se obtiene el siguiente par de ecuaciones para la coordenada *j*-ésima:

$$\dot{q}_{j} = \frac{1}{m} p_{j},$$

$$\dot{p}_{j} = -\kappa (2q_{j} - q_{j+1} - q_{j-1}) - (q_{j-1})^{2} - \alpha \left[(q_{j} - q_{j-1})^{2} - (q_{j+1} - q_{j})^{2} \right] - \beta \left[(q_{j} - q_{j-1})^{3} - (q_{j+1} - q_{j})^{3} \right],$$
(2.8)

que en conjunto forman un sistema de 2N EDO de primer orden y autónomo. Se trata de un sistema de EDO hamiltoniano conservativo. En general será no integrable, pero para $\alpha = \beta = 0$ (el caso lineal) el sistema sí que será integrable y en la siguiente sección se verá que las energías asociadas a los modos normales forman un sistema completo de integrales del movimiento.

Condiciones de Contorno Periódicas

Para concluir esta sección, se estudia el caso de la cadena FPU con condiciones de contorno periódicas. Este caso es de interés dado que las coordenadas normales del sistema lineal asociado a este vienen dadas por la transformada discreta de Fourier, como veremos, y es este sistema de coordenadas el que utilizaron Fermi, Pasta, Ulam y algunos autores posteriores para estudiar el intercambio de energía entre modos en el sistema perturbado.

Las condiciones de contorno periódicas se dan sobre una cadena infinitamente larga de masas discretas, dispuestas a lo largo de todo el eje X. Si se considera una posición de equilibrio distinguida (porque en esta disposición la posición de equilibrio no es única) y se define la familia de coordenadas conjugadas $\{q_j, p_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$ de modo análogo a la cadena FPU normal, entonces las condiciones de contorno periódicas serían:

$$q_j = q_{j+kN}, \qquad \qquad p_j = p_{j+kN}$$

donde $j = 1, \ldots, N$ y para todo $k \in \mathbb{Z}$. Es decir, cada segmento de longitud L de esta cadena se comportaría de forma idéntica a los segmentos de longitud L adyacentes, y basta con estudiar el sistema en uno solo de estos segmentos. En realidad, este sistema se comporta como el descrito en la figura 2.1 si se suprime las masas fijas de los extremos y se añade que las partículas de índices 1 y N interaccionan entre sí como si fuesen adyacentes y en función de $q_N - q_1$. Los estados de equilibrio se caracterizan por la traslación de este segmento de la cadena, dado que las variables $q_j - q_k$ permanecen iguales ante una transformación $\hat{q}_j = q_j + \hat{x}$.¹ Nótese que en el límite cuando N tiende a infinito, este sistema equivale al de una cuerda vibrante continua infinita con condiciones periódicas, y cada segmento se comporta como una cuerda vibrante continua unida por los extremos.

Cuando se haga referencia al sistema con coordenadas periódicas, se considerará el sistema finito del segmento descrito. Sin entrar en muchos detalles, se tiene que la energía cinética de este sistema también viene dada por (2.4) y que la energía potencial se sigue, en la aproximación utilizada para el otro sistema, de sustituir las constantes q_0 y q_{N+1} por las coordenadas q_N y q_1 en la ecuación (2.5), respectivamente, y omitiendo el término con k = N+1 en las sumas. Manteniendo este cambio de constantes por coordenadas, las ecuaciones del movimiento que se derivan de la función lagrangiana son las de la ecuación (2.6). La lagrangiana de este sistema también lleva a la relación $p = m\dot{q}$, de modo que se tiene un sistema de coordenadas naturales. Entonces H = E, y la hamiltoniana viene dada por la ecuación (2.7) aceptando los cambios de constantes por coordenadas y omitiendo el término con k = N + 1 de todas las sumas. Por todo esto, las ecuaciones del movimiento que se derivan de la hamiltoniana son las ecuaciones (2.8), de nuevo, con el cambio de constantes por coordenadas.

2.2. Aproximación Lineal y los Modos Normales.

En esta sección se resuelve la aproximación lineal del sistema de la cadena FPU. En primer lugar, se verá que este sistema simplificado puede formularse matricialmente y, considerando que la matriz del sistema de EDO es diagonalizable, lleva a un cambio de coordenadas con ecuaciones del movimiento independientes. Estas se llaman coordenadas normales del sistema y se van a calcular tanto sus energías como las transformaciones a coordenadas generalizadas q. Finalmente, se adaptarán los resultados al caso con condiciones de contorno periódicas.

Problema Lineal y Coordenadas Normales

Consideremos el sistema de la cadena FPU original, sin las condiciones de contorno periódicas. Como se ha indicado previamente, la aproximación lineal consiste en tomar tan solo el primer término no nulo para las fuerzas (2.1). La función potencial resultante es la siguiente:

$$U(q_1, \dots, q_N) = \frac{\kappa}{2} \sum_{k=1}^{N+1} (q_k - q_{k-1})^2,$$
(2.9)

que coincide con la primera suma del potencial (2.5). Esta expresión puede escribirse en forma matricial como $q^T \frac{1}{2} \mathcal{M}_U q$, siendo \mathcal{M}_U la matriz de entrada $\frac{\partial^2 U}{\partial q_j \partial q_k}$ para la fila j y columna k. Se escribe la matriz

¹En la cadena FPU original no ocurría así por ser $q_0 = q_{N+1} = 0$ constantes y no coordenadas generalizadas del sistema.

explícitamente:

$$\mathcal{M}_U = \begin{pmatrix} 2\kappa & -\kappa & & \\ -\kappa & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -\kappa \\ & & & -\kappa & 2\kappa \end{pmatrix},$$

donde las regiones sin rellenar corresponden a ceros. La energía cinética para este caso es la misma que para el caso general y viene dada en la ecuación (2.4). Con las energías potencial y cinética se saca la función lagrangiana, y mediante las ecuaciones de Euler-Lagrange (1.3) se obtiene las siguientes ecuaciones del movimiento:

$$\ddot{q}_j = \frac{\kappa}{m} \left(-2q_j + q_{j-1} + q_{j+1} \right), \tag{2.10}$$

que forman un sistema de EDO de orden 2 lineal homogéneo y autónomo, y que puede escribirse matricialmente como $\ddot{q} = \frac{-1}{m} \mathcal{M}_U q$. Se observa que la matriz del sistema de EDO es simétrica, y por ende es diagonalizable. Además de simétrica, es una matriz tridiagonal. Puede consultarse [Elliot, 1953] para ver que los valores propios de la matriz $\frac{1}{m} \mathcal{M}_U$ son los siguientes:

$$\omega_r^2 = \frac{4\kappa}{m} \sin^2 \left(\frac{r\pi}{2(N+1)} \right),\tag{2.11}$$

para cada $r = 1, \ldots, N$. La notación escogida para los valores propios se hará evidente al resolver las ecuaciones del movimiento de las coordenadas normales. La matriz $\frac{1}{m}\mathcal{M}_U$ puede diagonalizarse utilizando una matriz de cambio de coordenadas. Se define la matriz Λ cuyas columnas son los vectores de una familia ortonormal de vectores propios asociados a los valores propios $\omega_1^2, \ldots, \omega_N^2$ de la matriz $\frac{1}{m}\mathcal{M}_U$. Dado que la familia de vectores es ortonormal, la matriz será ortogonal, es decir, se cumple que $\Lambda^{-1} = \Lambda^T$. En definitiva, se tiene que $\Lambda \frac{1}{m}\mathcal{M}_U\Lambda^T$ es la matriz diagonal de elementos $\omega_1^2, \ldots, \omega_N^2$ en la diagonal.

Ahora se manipulará el sistema de EDO en notación matricial. Multiplicando por la matriz Λ y su traspuesta a conveniencia, se sigue la identidad:

$$\Lambda \ddot{q} = (\Lambda \frac{-1}{m} \mathcal{M}_{U_L} \Lambda^T) \Lambda q,$$

en la que el producto de matrices entre paréntesis es una matriz diagonal. Si se introduce el cambio de coordenadas $\eta = \Lambda q$, que implica que $\dot{\eta} = \Lambda \dot{q}$ y $\ddot{\eta} = \Lambda \ddot{q}$, se tendrá un sistema de EDO formado por las siguientes ecuaciones independientes:

$$\ddot{\eta}_r + \omega_r^2 \eta_r = 0, \tag{2.12}$$

para r = 1, ..., N. La solución general a cada una de estas ecuaciones del movimiento da la siguiente expresión del r-ésimo modo normal:

$$\eta_r(t) = \alpha_r \cos\left(\omega_r t\right) + \beta_r \sin\left(\omega_r t\right), \qquad (2.13)$$

donde α_r , β_r son coeficientes reales. Se observa que cada $\eta_r(t)$ es una función periódica y que la cantidad ω_r es su frecuencia angular. Por ello, se dice frecuencias normales del sistema a las cantidades $\omega_1, \ldots, \omega_N$.

Energías de los Modos Normales

A continuación se construye la función lagrangiana de la que se deriva cada una de las ecuaciones (2.12). Para hacer esto, se introduce el cambio de coordenadas en las expresiones matriciales de las energías cinética y potencial, de modo que las matrices asociadas se diagonalizan y se obtiene unos términos independientes para cada η_r en las energías cinética y potencial. Para la energía cinética se sigue que:

$$T(\dot{q}) = \dot{q}^T \mathcal{M}_T \dot{q} = (\dot{q}^T \Lambda^T) \Lambda \mathcal{M}_T \Lambda^T (\Lambda \dot{q}) = \dot{\eta}^T \mathcal{M}_T \dot{\eta} = T(\dot{\eta}),$$

donde $\mathcal{M}_T = \frac{m}{2} I d_N$ lleva a la igualdad $\Lambda \mathcal{M}_T \Lambda^T = \mathcal{M}_T$. De manera similar, la energía potencial cumple:

$$U(q) = q^T \frac{1}{2} \mathcal{M}_U q = (q^T \Lambda^T) \Lambda \frac{1}{2} \mathcal{M}_U \Lambda^T (\Lambda q) = \eta^T \hat{\mathcal{M}}_U \eta = U(\eta),$$

donde $\hat{\mathcal{M}}_U$ es la matriz diagonal de elementos $\frac{m}{2}\omega_1^2, \ldots, \frac{m}{2}\omega_N^2$ en la diagonal principal. Tanto $T(\dot{\eta})$ como $U(\eta)$ vienen dadas por una matriz diagonal y son sumas de términos que dependen de un único modo. Se denota $T_r(\dot{\eta}_r) = \frac{m}{2}\dot{\eta}_r^2$ y $U_r(\eta_r) = \frac{m}{2}\omega_r^2\eta_r^2$, siendo que la sumas de todos estos dan $T(\dot{\eta})$ y $U(\eta)$, respectivamente. Puede verse que $L_r = T_r - U_r$ es la función lagrangiana de la que se deriva la ecuación (2.12), luego puede decirse que estas son las energías cinética y potencial de la coordenada η_r .

Ahora se obtendrá la ecuación hamiltoniana de cada modo. El momento generalizado de la coordenada η_r se define como $\sigma_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_r} = \frac{\partial L_r}{\partial \dot{\eta}_r} = m \dot{\eta}_r$. Entonces, puede escribirse la función hamiltoniana para el modo η_r como:

$$H_r(\eta_r, \sigma_r) = \frac{1}{2m} \sigma_r^2 + \frac{m\omega_r^2}{2} \eta_r^2.$$
 (2.14)

La suma de las funciones hamiltonianas H_r da la ecuación hamiltoniana del sistema lineal en estas coordenadas. Si se sustituye σ_r por $m\dot{\eta}_r$ en la ecuación, se obtiene que H_r coincide con la función de la energía del modo r-ésimo $E_r = T_r + U_r$. Resultará interesante conocer la expresión de la energía del modo η_r como una función de los coeficientes α_r y β_r de la expresión (2.13):

$$E_r = T_r + U_r = \frac{m}{2} \left(\dot{\eta}_r^2 + \omega_r^2 \eta_r^2 \right) = \frac{m\omega_r^2}{2} \left(\alpha_r^2 + \beta_r^2 \right).$$
(2.15)

Se observa que las hamiltonianas H_r no dependen explícitamente del tiempo, luego la energía de cada modo normal es una integral del movimiento del sistema lineal. A su vez, cada valor de energía de un modo lleva a una única trayectoria del espacio de fases de las coordenadas η_r , σ_r del modo en cuestión, y en conjunto se tiene que si se conoce la energía asociada a cada modo, entonces queda determinada la trayectoria del sistema lineal en el espacio de fases de las coordenadas η , σ . Dicho con otras palabras, se tiene un conjunto suficiente de integrales del movimiento como para determinar la trayectoria del sistema a partir de los valores que tomen estas. Se tiene que el sistema lineal es integrable.

Transformaciones entre Coordenadas

Lo que resta por hacer es dar de manera explícita la transformación a coordenadas normales. También se verá la transformación inversa y la manera de obtener los coeficientes α_r , β_r de los modos normales a partir de las condiciones iniciales del sistema utilizando dicha transformación.

En primer lugar, se consulta de nuevo [Elliot, 1953] para escribir un vector propio asociado al r-ésimo valor propio ω_r^2 visto en (2.11):

$$v_r = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \left(\sin\left(\frac{r\pi}{N+1}\right), \sin\left(2\frac{r\pi}{N+1}\right), \dots, \sin\left(N\frac{r\pi}{N+1}\right) \right),$$

donde la constante se escoge para que el vector tenga norma 1. Los valores propios $\omega_1^2, \ldots, \omega_N^2$ son distintos, luego la familia de vectores propios v_1, \ldots, v_N es ortonormal. Entonces, Λ se definirá como la matriz cuya columna *r*-ésima sea v_r . Se conoce que la matriz Λ es ortogonal, pero se observa que además es simétrica. Entonces $\Lambda^{-1} = \Lambda$ y las transformaciones inversas son:

$$q = \Lambda \eta, \qquad \qquad p = \Lambda \sigma. \tag{2.16}$$

Se considera los coeficientes $\alpha_r \neq \beta_r$ del modo normal η_r escrito en la forma (2.13). Se tiene que $\eta_r(0) = \alpha_r$ y que $\dot{\eta}_r(0) = \beta_r$, así que si $q^{(0)}$, $p^{(0)}$ son las condiciones iniciales del sistema, a tiempo t = 0, entonces se tiene las siguientes transformaciones con la matriz Λ :

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} q_1^{(0)} \\ \vdots \\ q_N^{(0)} \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} m\omega_1\beta_1 \\ \vdots \\ m\omega_N\beta_N \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} p_1^{(0)} \\ \vdots \\ p_N^{(0)} \end{pmatrix}, \qquad (2.17)$$

cuyas transformaciones inversas están dadas también por la matriz Λ . Estas transformaciones permiten encontrar la solución particular del sistema lineal en la forma $\eta(t)$, dado que basta con conocer los coeficientes α_r , β_r de las funciones (2.13). Esta solución se puede escribir también en la forma q(t), p(t)utilizando las transformaciones (2.16) y la ecuación $\sigma(t) = m\dot{\eta}(t)$. Para el sistema no lineal se tiene una solución q(t), p(t) que no es analítica, pero que se calculará numéricamente para distintos valores de tiempo. Si en un tiempo $t = \hat{t}$ se ha calculado unos valores $\hat{q} \neq \hat{p}$, entonces puede obtenerse la energía del *r*-ésimo modo normal del sistema lineal asociado transformando la ecuación (2.15) en la siguiente:

$$E_r = \frac{1}{2m} \left((v_r^T \hat{p})^2 + (m\omega_r v_r^T \hat{q})^2 \right), \qquad (2.18)$$

donde se ha usado el producto por el vector v_r dado que la matriz Λ es simétrica. Esta expresión permite estudiar las energías de los modos normales en la cadena FPU.

Modos Normales con las Condiciones de Contorno Periódicas

Para finalizar esta sección, se adaptarán todos los resultados que se han visto para el caso con condiciones de contorno periódicas. Se omiten los procedimientos, pero estos son parecidos a los del caso sin condiciones periódicas, salvo que se indique lo contrario.

El potencial para el sistema lineal asociado es el dado por la ecuación (2.9) si se omite el término con k = N + 1 de la suma y aceptando el cambio de las constantes q_0 y q_{N+1} por las coordenadas q_N y q_1 , respectivamente. La notación matricial se mantiene, pero sustituyendo la matriz \mathcal{M}_U por:

$$\mathcal{M}_{U_{ccp}} = \begin{pmatrix} 2\kappa & -\kappa & -\kappa \\ -\kappa & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -\kappa \\ -\kappa & & -\kappa & 2\kappa \end{pmatrix},$$

donde las entradas sin especificar corresponden a ceros. La energía cinética es la misma y se deriva un sistema de EDO, dado por las ecuaciones (2.10) si se asume el cambio habitual de constantes por coordenadas. De nuevo, se mantiene la notación matricial para el sistema de EDO, pero la matriz $\frac{1}{m}\mathcal{M}_{U_{ccp}}$ es distinta de la otra y tendrá unos valores propios asociados distintos. Es igualmente una matriz simétrica con coeficientes reales, luego sus valores propios son reales. En este caso, la matriz es circulante y puede verse en [Lara, 2001] que sus valores propios son los siguientes:

$$\omega_{r_{ccp}}^2 = \frac{4\kappa}{m} \sin^2\left(\frac{r\pi}{N}\right),\,$$

para r = 1, ..., N y donde la notación $\omega_{r_{ccp}}^2$ también se ha escogido pensando en que $\omega_{1_{ccp}}, ..., \omega_{N_{ccp}}$ son las frecuencias normales del sistema. El vector propio asociado a $\omega_{r_{ccp}}^2$ se tiene en variable compleja y sería:

$$u_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\zeta^{0(r-1)}, \zeta^{1(r-1)}, \dots, \zeta^{(N-1)(r-1)} \right),$$

donde ζ denota a la exponencial compleja $exp(i2\pi/N)$, que es raíz *N*-ésima de la unidad. Se define la matriz Λ_{ccp} cuyas columnas son los vectores w_1, \ldots, w_N , que es simétrica y que diagonaliza a la matriz $\frac{1}{m}\mathcal{M}_{U_{ccp}}$.² Además es una matriz unitaria, $\Lambda_{ccp}^{-1} = \Lambda_{ccp}^{\dagger}$, donde el exponente de esta última denota la traspuesta conjugada de una matriz. En resumen, $\Lambda_{ccp} \frac{1}{m}\mathcal{M}_{U_{ccp}}\Lambda_{ccp}^{\dagger}$ es la matriz diagonal de elementos $\omega_{1_{ccp}}^2, \ldots, \omega_{N_{ccp}}^2$ en la diagonal principal.

La matriz Λ_{ccp} define el cambio a coordenadas normales. Si estas se denotan por η , son válidas las ecuaciones del movimiento (2.12) y las soluciones (2.13) al sustituir cada ω_r por $\omega_{r_{ccp}}$. Las soluciones explícitas a partir de unas condiciones iniciales se siguen de las ecuaciones (2.17), si además se sustituye Λ por Λ_{ccp} . Con estas notaciones y cambios, los resultados sobre las hamiltonianas y las energías de los modos vienen también dados por las mismas expresiones. Falta por aclarar que, como Λ_{ccp} es unitaria y no ortogonal, las transformaciones inversas de la subsección anterior vienen dadas por las mismas ecuaciones pero sustituyendo Λ por Λ^{\dagger}_{ccp} . En particular, se reescribe las transformaciones (2.16) como:

$$q = \Lambda^{\dagger}_{ccp} \eta, \qquad \qquad p = \Lambda^{\dagger}_{ccp} \sigma, \qquad (2.19)$$

²Como curiosidad, la matriz Λ_{ccp} es la matriz unitaria asociada a la transformada de Fourier discreta, DFT en inglés.

lo que lleva a reescribir también la expresión de ${\cal E}_r$ vista en (2.18) como sigue:

$$E_r = \frac{1}{2m} \left((w_r^T \hat{p})^2 + (m\omega_r w_r^T \hat{q})^2 \right),\,$$

donde de nuevo se aprovecha que la matriz Λ_{ccp}^{\dagger} es simétrica para meter el producto por w_r^{\dagger} y \hat{q}, \hat{p} es la solución del problema no lineal calculada para $t = \hat{t}$.

Capítulo 3

Métodos de Integración Geométrica.

La cadena FPU es un sistema para el que no se tiene una solución explícita, y por ello es necesario recurrir a métodos numéricos para calcular sus trayectorias. En este capítulo se introducen los métodos de integración numérica, que son aquellos que resuelven el problema de recrear la trayectoria de un sistema de EDO. Se discutirá sobre los criterios de bondad de un método, que a grandes rasgos son su rapidez de ejecución y la precisión numérica. Dado que se trabaja con sistemas de EDO hamiltonianos, se hablará también de integración geométrica y de métodos que preservan las propiedades cualitativas del flujo de la EDO. Después, se presentarán una colección de métodos sencillos y finalizaremos probando el desempeño de estos métodos en la cadena FPU.

La elaboración de este capítulo está basada en el apéndice contenido en [Sanz, 2007] para el apartado teórico. Para la presentación de los métodos y de sus propiedades se ha seguido [Crivelli, 2008] y [Ruth, 1983].

3.1. Métodos de Integración Numérica.

En esta sección se trata el problema de la integración numérica. Dada la imposibilidad de resolver nuestro sistema no lineal de forma analítica, la solución práctica será utilizar métodos numéricos para calcular las trayectorias. Consideremos un sistema mecánico cuya función hamiltoniana no dependa explícitamente del tiempo, y cuyo potencial U solo dependa de las coordenadas q, como es el caso de la cadena FPU. Las ecuaciones del Hamilton (1.4) llevan a plantear el siguiente sistema de EDO:

$$\begin{pmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m}p \\ -\nabla_q U \end{pmatrix} = g(q, p), \tag{3.1}$$

formado por 2N EDO de primer orden y autónomas. Se trata de un sistema de EDO hamiltoniano conservativo, ya introducidos en la sección 1.2. Este tipo de sistemas tienen asociada una colección de funciones Φ_{t_1} definidas para cada tiempo $t_1 \in \mathbb{R}$, y que se denomina el flujo de la EDO. La función Φ_{t_1} es una transformación del espacio de fases en sí mismo, y lleva cada punto de este o estado del sistema al estado único en el que puede encontrarse pasado un tiempo t_1 .

Los métodos de integración numérica consisten en un esquema iterativo, donde se calcula en cada iteración el siguiente punto de la trayectoria en el espacio de fases, con un paso de tiempos Δt . Es decir, que la iteración de los métodos de integración numérica tratan de parecerse a la función $\Phi_{\Delta t}$ del flujo del sistema. Por este motivo, se dice flujo numérico asociado a un método de integración numérica a una colección de funciones $\{\Psi_{\Delta t} : \Delta t \in \mathbb{R}\}$ definidas en el espacio de fases y cuya imagen es la iteración del método con un paso de tiempos Δt . Dado que es habitual fijar un paso Δt para todas las iteraciones del método en una simulación, se cometerá el abuso de notación de llamar flujo o flujo numérico a $\Phi_{\Delta t}$ o a $\Psi_{\Delta t}$.

Métodos Simples de Integración Numérica

Aquí se introducirá un par de métodos de integración numérica: el método de Euler explícito y el método del punto medio. Se trata de dos métodos explícitos y de fácil implementación. Un método explícito es

aquel cuyos pasos se formulan de manera explícita. Por el contrario, un método implícito es aquel donde alguno de los parámetros que se ha de ir calculando se da de forma implícita, por ejemplo, como solución de un sistema de ecuaciones lineales. Los métodos que vamos a ver caen en la categoría de métodos de Runge-Kutta, que no estudiaremos en este texto, pero que merece la pena mencionar.

Comencemos por ver el método más sencillo de los dos, el método explícito de Euler. Existe una versión implícita de este método, pero no nos ocuparemos de ella. El método de Euler se basa en aproximar la derivada de cada función incógnita x(t) como:

$$\dot{x}(t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} \approx \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t},$$

donde el valor Δt escogido para el término de la derecha será el paso de tiempo de la iteración del método. Nótese que la aproximación será más precisa a más pequeño sea el paso de tiempo, pero esto supone un mayor coste computacional¹ para recrear una misma parte de la trayectoria. Utilizando esta aproximación, se define la iteración del método de Euler explícito como el siguiente flujo numérico:

$$\Psi_{\Delta t}^{Eu}(q^{(0)}, p^{(0)}) = (q^{(0)}, p^{(0)}) + \Delta t g(q, p),$$

siendo $q^{(0)}$ y $p^{(0)}$ los valores con los que inicia el método y tomando las notaciones del sistema (3.1). Obviamente, si (q(t), p(t)) es solución a dicho sistema de EDO junto con las condiciones iniciales $q^{(0)}, p^{(0)}$, el método pretende dar una aproximación:

$$\Psi_{\Delta t}^{Eu}(q^{(0)}, p^{(0)}) \approx \Phi_{\Delta t}(q^{(0)}, p^{(0)}) = (q(\Delta t), p(\Delta t)).$$

Pasemos a ver el método del punto medio. Este método, en contraste con el anterior, tiene un cálculo intermedio en cada iteración, va en dos fases. Esta es una característica de los métodos de Runge-Kutta, que para completar la iteración se añaden fases intermedias. En este caso, la fase intermedia consistirá en hacer un primer salto de tiempo $\Delta t/2$ con la iteración de Euler. Con el valor calculado, se efectúa el salto del tiempo $\Delta t/2$ restante. En el apartado siguiente hablaremos de la precisión de los métodos numéricos y, sin entrar a discutir el porqué, veremos en qué sentido este aspaviento mejora el método de Euler explícito. Por ahora, se define la iteración del método del punto medio como el flujo numérico:

$$\Psi_{\Delta t}^{pm}(q^{(0)}, p^{(0)}) = (q^{(0)}, p^{(0)}) + \Delta t g(\Psi_{\Delta t/2}^{Eu}(q^{(0)}, p^{(0)})),$$

de nuevo, adoptando las notaciones del sistema (3.1). Efectivamente, el método del punto medio consiste en calcular un punto medio con el método de Euler para después hacer el incremento con el gradiente del potencial evaluado en dicho punto. A primera vista puede parecer que este método es reversible temporalmente, es decir, que si $(q^{(1)}, p^{(1)}) = \Psi_{\Delta t}^{pm}(q^{(0)}, p^{(0)})$, entonces $(q^{(0)}, p^{(0)}) = \Psi_{-\Delta t}^{pm}(q^{(1)}, p^{(1)})$. Pero esto no es así porque los puntos intermedios $\Psi_{\Delta t/2}^{Eu}(q^{(0)}, p^{(0)})$ y $\Psi_{-\Delta t/2}^{Eu}(q^{(1)}, p^{(1)})$ no necesariamente coinciden.

Sobre la Computadora y Errores de los Métodos de Integración

En primer lugar, se debe señalar que una computadora sigue el mismo paradigma del cálculo numérico con lápiz y papel, solo que ofrece mayor velocidad en el cálculo y más capacidad de memoria. Una computadora simplemente almacena datos en forma de cadenas de elementos del lenguaje binario y realiza operaciones aritméticas con ellas. Sus principales limitaciones son que utiliza una memoria finita, el tiempo de cálculo, y también los errores de cálculo. A menudo, los métodos que ofrecen mayor precisión requieren más operaciones, lo que se traduce en un mayor tiempo. A la hora de escoger entre uno u otro método, se busca que pueda llevarse a cabo en un tiempo razonable, pero que sus resultados sean suficientemente fiables.

Los errores en el cálculo numérico tienen múltiples causas. Se suele trabajar en conjuntos numéricos infinitos, mientras que la memoria limitada de un computador permite representar tan solo una cantidad

 $^{^{1}}$ Este término se refiere al número de operaciones aritméticas que realiza la máquina en un determinado programa. Hablar del coste computacional de un programa es como hablar del tiempo de ejecución de este.

finita de estos. Los errores asociados a la representación de los números se conocen como errores de redondeo o truncamiento, y dependen exclusivamente de la máquina.

El error de un cálculo numérico también puede deberse al propio método, independientemente de los errores de redondeo que cometa la máquina. La integración de una trayectoria de un sistema de EDO en variable real, que es el problema que nos ocupa, no puede resolverse con una sucesión finita de operaciones aritméticas salvo que se acepte alguna aproximación, como por ejemplo, la que se vio para el método de Euler. Tomar estas aproximaciones lleva a discrepancias entre el valor calculado y el valor real que se quiere calcular.

Los métodos que sirven para obtener las trayectorias de un sistema de EDO, como ya hemos visto, consisten en construir una función $\Psi_{\Delta t}$ del flujo numérico dado un paso de tiempo Δt . Entonces, partiendo de un punto inicial del espacio de fases $(q^{(0)}, p^{(0)})$, se va calculando $(q^{(k+1)}, p^{(k+1)}) = \Psi_{\Delta t}(q^{(k)}, p^{(k)})$ para cada $k \in \mathbb{N}$ hasta un cierto valor. Cada vez que se obtiene un nuevo $(q^{(k)}, p^{(k)})$, se tiene un error que va propagándose en cada nueva iteración del método. Definamos la siguiente cantidad:

$$\delta_{\Delta t} = ||\Psi_{\Delta t}(q^{(0)}, p^{(0)}) - \Phi_{\Delta t}(q^{(0)}, p^{(0)})||,$$

que es una medida del error cometido en cada iteración en función del paso Δt , digamos, el error local. Se dice que un método con flujo numérico asociado $\Psi_{\Delta t}$ es de orden el menor entero positivo p para el que se cumpla:

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{\delta_{\Delta t}}{(\Delta t)^{p+1}} = 0$$

que implica que exista una constante $C \in \mathbb{R}$ positiva tal que se tenga la siguiente cota del error local:

$$\delta_{\Delta t} \le C(\Delta t)^p$$

dado cualquier Δt que sea lo suficientemente próximo a 0. El método de Euler explícito es de orden 1 y el método del punto medio es de orden 2, es decir, puede esperarse mayor precisión numérica del segundo. Este enfoque a la hora de interpretar el error es puramente cuantitativo. Las trayectorias de un sistema de EDO presentan rasgos cualitativos que pueden perderse en la solución numérica calculada, dado que los errores de cálculo, por pequeños que sean, no respetan en general a estos aspectos. Esta falla de los métodos numéricos clásicos ha llevado al desarrollo de los llamados métodos de integración geométrica. Estos métodos devuelven una solución aproximada, pero respetando alguna característica de la solución real. Es decir, la solución calculada será la solución real de algún problema cualitativamente igual al original en algún sentido.

Un ejemplo ilustrativo de esto es la propiedad de reversibilidad temporal que, como se dijo, no se cumple para el método del punto medio. El flujo Φ_t asociado al sistema de EDO hamiltoniano (3.1) cumple que $(\Phi_t)^{-1} = \Phi_{-t}$, que equivale a la propiedad de reversibilidad temporal antes vista. Si se quiere aproximar a la función $\Phi_{\Delta t}$ con un método, parece razonable exigir que la función $\Psi_{\Delta t}$ del flujo numérico asociado a ese método satisfaga la misma propiedad $(\Psi_{\Delta t})^{-1} = \Psi_{-\Delta t}$.

Propiedades Geométricas de los Flujos

En este apartado presentamos algunos métodos que preservan propiedades cualitativas de las soluciones. Comenzaremos por explicar algunas de estas propiedades en relación con el flujo numérico $\Psi_{\Delta t}$ de un método. La primera propiedad ya la hemos introducido en los apartados previos, y es la reversibilidad temporal del método. Esto es que si a partir de unos valores iniciales $q^{(0)}, p^{(0)}$ se obtiene $q^{(k)}, p^{(k)}$ tras k iteraciones de $\Psi_{\Delta t}$, se obtenga como resultado $q^{(0)}, p^{(0)}$ si se inicia el método con $q^{(k)}, p^{(k)}$ y se realiza k iteraciones de $\Psi_{-\Delta t}$, salvo errores de redondeo. Esta propiedad la satisfacen los flujos numéricos simétricos, que se definen como aquellos tales que:

$$(\Psi_{\Delta t})^{-1} = \Psi_{-\Delta t},$$

para todo $\Delta t \in \mathbb{R}$. Otra propiedad geométrica consiste en la reversibilidad de caminos, es decir, si partiendo de un punto $q^{(0)}$ con una velocidad $p^{(0)}$ se alcanza el punto $q^{(1)}$ con velocidad $p^{(1)}$ en un

tiempo Δt , se cumple que, partiendo de $q^{(1)}$ con velocidad $-p^{(1)}$, se alcanza el punto inicial $q^{(0)}$ en un tiempo Δt y con velocidad $-p^{(0)}$. Se dice flujo numérico reversible a aquel que satisfaga esta propiedad:

$$\Psi_{\Delta t}(q^{(0)}, p^{(0)}) = (q^{(1)}, p^{(1)}) \Rightarrow \Psi_{\Delta t}(q^{(1)}, -p^{(1)}) = (q^{(0)}, -p^{(0)}),$$

para cada $\Delta t \in \mathbb{R}$ y cada $(q^{(0)}, p^{(0)}) \in \mathbb{R}^{2N}$. La última propiedad que mencionaremos es la propiedad de preservación del volumen, conocida también como el Teorema de Liouville. Si Φ_t es el flujo de un sistema hamiltoniano, entonces un subconjunto Ω del espacio de fases \mathbb{R}^{2N} tendrá el mismo volumen que el conjunto imagen $\Phi_t(\Omega)$, para cualquier $t \in \mathbb{R}$ escogido. En geometría simpléctica, Φ_t sería una transformación simpléctica o simplectomorfismo, noción que consiste en cumplir la propiedad siguiente:

$$J(\Phi_t)^T \begin{pmatrix} 0 & Id_N \\ -Id_N & 0 \end{pmatrix} J(\Phi_t) = \begin{pmatrix} 0 & Id_N \\ -Id_N & 0 \end{pmatrix},$$

donde $J(\Phi_t)$ denota la matriz jacobiana de Φ_t . Se dice que el flujo { $\Phi_t : t \in \mathbb{R}$ } de un sistema de EDO es simpléctico si cada Φ_t es una transformación simpléctica. De igual forma se dice que el flujo numérico de un método de integración es simpléctico y en tal caso, que el método es simpléctico. Las transformaciones simplécticas preservan, además de los volúmenes, algunas áreas específicas que se conocen como invariantes integrales de Poincaré.²

Métodos Simplécticos

Ahora se verá un par de métodos geométricos. El primero de estos métodos es uno de los más simples y conocidos dentro de la categoría de métodos simplécticos, y se conoce como método leapfrog o método de Störmer-Verlet. Es un método de orden 2 que satisface todas las propiedades geométricas del apartado anterior. En este caso, definir el flujo numérico de manera explícita resulta conflictivo, por lo que será mejor enunciar el método en forma de algoritmo:



Típicamente, este método se presenta para sistemas de EDO de orden 2, como es el caso de la formulación lagrangiana, pero se ha escogido adaptarlo al caso de la formulación hamiltoniana. El método es simétrico, reversible y simpléctico. Se trata de un método relativamente simple para la cantidad de propiedades que preserva, pero no tiene un orden muy alto. En consecuencia, este será un método rápido y se usará para simulaciones largas si se observa que no introduce un error significativo.

El segundo y último método geométrico que veremos se debe a R. D. Ruth, quien propone en su artículo [Ruth, 1983] una manera de derivar métodos simplécticos a partir de transformaciones canónicas. Se trata de un método de orden 3 que también es simétrico, reversible y simpléctico. A continuación se indica el método, una vez más, en forma de algoritmo:

 $[\]label{eq:product} \ensuremath{^2\text{Puede consultarse: https://www.raulbarrachina.com.ar/wp-content/uploads/2020/01/mecanica_027.pdf.}$

entrada: $q^{(0)}$, $p^{(0)}$ i := 0mientras $i\Delta t < T$: calcular $p^{(i+\frac{1}{3})} = p^{(i)} - \frac{7\Delta t}{24} \nabla_q U(q^{(i)})$ calcular $q^{(i+\frac{1}{3})} = q^{(i)} + \frac{2\Delta t}{3m} p^{(i+\frac{1}{3})}$ calcular $q^{(i+\frac{2}{3})} = q^{(i)} + \frac{3\Delta t}{3m} \nabla_q U(q^{(i+\frac{1}{3})})$ calcular $p^{(i+\frac{2}{3})} = p^{(i+\frac{1}{3})} - \frac{3\Delta t}{4} \nabla_q U(q^{(i+\frac{2}{3})})$ calcular $q^{(i+\frac{2}{3})} = q^{(i+\frac{1}{3})} - \frac{2\Delta t}{3m} p^{(i+\frac{2}{3})}$ calcular $p^{(i+1)} = p^{(i+\frac{2}{3})} + \frac{\Delta t}{24} \nabla_q U(q^{(i+\frac{2}{3})})$ calcular $q^{(i+1)} = q^{(i+\frac{2}{3})} + \frac{\Delta t}{m} p^{(i)}$ i := i + 1fin salida: $Q := (q^{(0)}, \dots, q^{(i)}), P := (p^{(0)}, \dots, p^{(i)}).$

ALGORITMO (Método de Ruth de Orden 3)

En comparación al método leapfrog, este será un método algo más lento, pero también más preciso. Se implementará este método para las simulaciones con tiempos cortos y moderados.

El desarrollo de nuevos métodos simplécticos de orden superior que siguen las ideas de Ruth de efectuar transformaciones canónicas, pueden seguirse en el artículo de 1989 escrito por Ronald D. Ruth y E. Forest titulado *"Fourth Order Symplectic Integration"*, al que le sigue el trabajo de H. Yoshida *"Construction of Higher Order Symplectic Integrators"* de 1990. En otra parte del espectro, Jesús M. Sanz publica en 1988 un criterio para caracterizar los métodos de Runge-Kutta que son simplécticos en su artículo *"Runge-Kutta schemes for Hamiltonian Systems"*.

3.2. Pruebas de los Métodos de Integración.

Después de la introducción teórica de la sección precedente, es hora de poner en práctica los resultados que allí se presentan. Se llevarán a cabo varias simulaciones de la cadena FPU a fin de mostrar el desempeño de los métodos y ver que coinciden con todo lo establecido. Para comenzar, se tomarán una serie de consideraciones en cuenta a la hora de realizar las simulaciones de la cadena FPU, todas ellas a nivel práctico. Se seguirá con unas pruebas sobre la precisión numérica de los métodos, basadas en la conservación de la energía del sistema. En ellas se hará patente la necesidad de implementar métodos simplécticos para estudiar este sistema. Por último, se harán unas pruebas sobre las propiedades geométricas.

Consideraciones sobre la Simulación

Cada simulación comienza con un estado inicial del sistema y unos parámetros que determinan el sistema. Por ejemplo, el número N de partículas del sistema, la masa m cada partícula o el valor de las constantes κ, α, β . Sin pérdida de generalidad en los resultados, se fija los valores de las constantes m = 1 y $\kappa = 1$, ambas en las unidades arbitrarias de la máquina (puede considerarse que están en unidades del sistema internacional si se prefiere). Los parámetros α y β han de ser pequeños en comparación a κ , en el sentido

de que la perturbación no sea de magnitud comparable a la del hamiltoniano lineal. Las variables N, α o β y la energía E del estado inicial estarán relacionadas entre sí, luego el tamaño del parámetro de perturbación para que se tenga la recurrencia dependerá de N y de E. Más adelante se discutirá las relaciones entre estos tres parámetros.

El número de iteraciones de la simulación se fijará definiendo el paso de tiempo Δt y el tiempo total de la simulación T_{tot} . Las unidades que maneja la máquina son arbitrarias, trabaja tan solo con valores numéricos, pero a la hora de mostrar los resultados se va a utilizar unidades del periodo de la frecuencia fundamental del sistema considerado. Esto es el valor $T_{fund} = 2\pi/\omega_1$, que dependerá del tamaño del sistema y de si se añaden o no las condiciones de contorno periódicas.

Para mostrar los resultados, también se utilizará como unidad de energía la energía del estado inicial, pero de una forma especial. A continuación se define una colección de estados iniciales, suficiente para efectuar las pruebas que se quiera y con una energía asociada de 1 en unidades arbitrarias de la máquina. Consideramos unas condiciones iniciales $\eta^{(0)}, \sigma^{(0)}$, que podrán transformarse en $q^{(0)}, p^{(0)}$ por medio de las ecuaciones (2.16) o (2.19), según el caso. Tomamos unos valores U_0 y T_0 para las energías potencial y cinética iniciales, tales que la energía del sistema sea $U_0 + T_0 = 1$. Si U_0 es distinto de 0, consideramos un subconjunto no vacío de los índices $1, \ldots, N$ y que se denotarán por i_1, \ldots, i_k . Si el subíndice s no pertenece a $\{i_1, \ldots, i_k\}$, entonces se tendrá que la condición inicial $\eta_s^{(0)} = 0$, y este modo tendrá energía potencial asociada nula para el estado inicial. Es decir, $\{i_1, \ldots, i_k\}$ serán los modos a los que queramos dar una energía potencial inicial. Además, para escalar las energías a conveniencia, se impone que:

$$U_{il} = C_{l+1} U_{i_{l+1}}, (3.2)$$

para l = 1, ..., k - 1 y con $C_2, ..., C_k$ unas constantes positivas. De todo esto se obtiene la ecuación:

$$U_{i_k} = U_0 \left(\sum_{l=1}^k \prod_{m=l+1}^k C_m \right)^{-1},$$

que junto a las ecuaciones (3.2) permite calcular de forma secuencial las energías potenciales de cada modo para que estas sumen U_0 y, mediante la relación $U_r = \frac{m}{2}\omega_r^2(\eta_r^{(0)})^2$, calcular las condiciones iniciales restantes de $\eta^{(0)}$. Se procede de manera análoga para las condiciones iniciales $\sigma^{(0)}$. En caso de que T_0 sea no nulo, se define el subconjunto ordenado de los subíndices j_1, \ldots, j_s para los que la condición inicial de $\sigma^{(0)}$ sea no nula. Nuevamente, se impone las condiciones

$$T_{j_l} = K_{l+1} T_{j_{l+1}}, (3.3)$$

para $l = 1, \ldots, s - 1$ y dados unos factores de escala K_2, \ldots, K_s no nulos. Esto resulta en la ecuación:

$$T_{j_s} = T_0 \left(\sum_{l=1}^{s} \prod_{m=l+1}^{s} K_m \right)^{-1},$$

que con las condiciones (3.3) permite calcular paso a paso las condiciones iniciales $\sigma^{(0)}$ restantes, considerando en este caso que $T_r = \frac{1}{2m} (\sigma_r^{(0)})^2$. De primeras, puede parecer un sistema complicado para elegir el estado inicial, pero es muy versátil en tanto que permite introducir cualquier relación entre las energías de los modos no nulos y de manera explícita. Nótese que este razonamiento puede generalizarse a cualquier energía inicial E sin más que aplicar la relación $E = U_0 + T_0$.

Por último, unos detalles sobre simetrías de la formulación de las cadenas FPU. La cadena α -FPU cumple la propiedad de que, ante una transformación $\alpha \to -\alpha$, las ecuaciones del movimiento del sistema son las mismas. Es decir, si llamamos $\alpha H'$ al término de perturbación con el coeficiente α de la hamiltoniana (2.7), puede comprobarse que $\partial(\alpha H')/\partial q_j$ será igual que $\partial(-\alpha H')/\partial q_j$ manipulando un poco la suma. Este hecho fue notificado en [TuMe, 1972].

En el caso de la cadena β -FPU, Fermi, Pasta y Ulam observaron que la computación de las últimas N/2 coordenadas es idéntica a las de las N/2 primeras cuando la condición inicial es una función simétrica

para las q, es decir, si cumple $j + k = N \Rightarrow q_j = q_k$. Un ejemplo sería la función seno que define el primer modo normal, o la función 'diente de sierra' con forma triangular que se utilizó también en [FPU, 1955]. La simetría ocurre para el caso con condiciones de contorno periódicas, para el cual la transformación $q_1, \ldots, q_N \to q_N, \ldots, q_1$ mantiene inalterada la función hamiltoniana del sistema.

Esta simetría de la cadena FPU tuvo una utilidad práctica enorme en su momento, dado que para simular la cadena β -FPU bastaba con calcular la evolución de la mitad de las partículas, si la condición inicial es simétrica. Hoy en día no es necesario limitarse a esto dada la diferencia en prestaciones de un ordenador personal promedio frente al MANIAC-I.

Pruebas sobre la Precisión de los Métodos

En este apartado se va a hacer unas pruebas sobre la precisión numérica de los métodos. Como los sistemas que estamos considerando son conservativos, resulta conveniente utilizar la energía total del sistema para ver la magnitud del error que se comete al utilizar uno u otro método. Los errores de redondeo de la máquina quedarán solapados por el error que introducen los métodos, así que no se tendrán en cuenta.

Para comenzar, se lleva a cabo una simulación de la cadena lineal con cada uno de los métodos. Puede verse los detalles y resultados de estas simulaciones en las figuras 3.1 y 3.2. Se ha representado el error relativo de las energías en cada iteración, tomando como valor real la energía inicial calculada. El error relativo se describe como $(E^{(k)} - E^{(0)})/E^{(0)}$, donde $E^{(k)}$ la energía calculada en la k-ésima iteración.



Figura 3.1: Se representa el error relativo $\delta E/E$ en función del tiempo en unidades del periodo de la frecuencia fundamental del sistema, calculado por el método leapfrog (a la izquierda) y por el método de Ruth (a la derecha). El estado inicial del sistema es η_1 con energía 1 en las unidades arbitrarias de la máquina. Se ha utilizado los parámetros N = 16, m = 1, $\kappa = 1$ y $\alpha = \beta = 0$ (sistema lineal).

A primera vista, se observa que los métodos simplécticos (figura 3.1) tienen un mejor desempeño que los otros dos métodos (figura 3.2). También puede verse que el error cometido describe patrones oscilatorios, característica que estará presente en todos las simulaciones que realicemos y que puede observarse en las representaciones de las energías de los modos en cualquier artículo, por ejemplo, en [FPU, 1955] o en [TuMe, 1972].

Se ha comprobado que los métodos de Euler y del punto medio introducen un error significativo en la energía total del sistema. Esto supone un forzamiento o rozamiento espurio del sistema, es decir, los errores hacen ganar o perder energía total al sistema. De hecho, en este caso se observa que el valor de la energía se dispara tras las sucesivas iteraciones, por lo que estos métodos experimentan problemas de $overflow^3$ que no les permiten hacer una simulación larga, ya no digamos precisa.

 $^{^{3}}$ Este término se refiere al valor máximo que puede representar la máquina. Cuando se opera un par de restas con este valor, el resultado es indeterminado porque los números que se quería representar inicialmente, posiblemente muy distintos, se han redondeado al valor de *overflow* y no puede determinarse su diferencia.



Figura 3.2: Valores de las energías del sistema calculadas por el método de Euler explícito (a la izquierda) y el método del punto medio (a la derecha). Las condiciones de la simulación son las mismas que las de la figura 3.1 para ambos casos.

Resulta llamativo que de estos dos métodos, el valor de la energía se dispare para el método de mayor orden antes que en el otro. Recordemos que el orden de un método tiene que ver con la precisión numérica de los $q^{(k)}, p^{(k)}$ calculados en cada iteración, no directamente con las energías. Más aún, el método del punto medio en particular se efectúa con un paso intermedio dado por la iteración del método de Euler, y si le sumamos que estos métodos, por construcción, no preservan el valor de la energía total, es razonable que al efectuar pasos intermedios se acumule un mayor forzamiento espurio en el sistema calculado. De todos modos, esto es irrelevante para el tema que nos ocupa y no nos centraremos en comprobar que sea así. Este par de métodos queda claramente descartado para correr ninguna simulación fiable de la cadena FPU.



Figura 3.3: Se muestra la comparación de los resultados de las simulaciones de la figura 3.1 para los métodos simplécticos.

Ahora compararemos el desempeño de los métodos simplécticos. Puede observarse que la magnitud de los errores numéricos cometidos por estos métodos es diferente. El método leapfrog alcanza discrepancias del orden de 10^{-4} , mientras que el método de Ruth no va mucho más allá de 10^{-7} . Puede verse la superposición de los valores calculados en la figura 3.3. Esto pone de manifiesto que el orden de un método repercute en la precisión numérica de los resultados.

Otro aspecto a valorar es la rapidez con que se ejecuta el método. En la tabla 3.1 se muestra los tiempos de ejecución de esta misma simulación variando el tamaño N del sistema. Un mayor tamaño del

sistema introduce más cálculos en la iteración de los métodos y esto da cuenta de la sensibilidad del tiempo de ejecución en función de este parámetro. Aunque la diferencia parece poca, nótese que el valor T_{tot} del tiempo total de la simulación empleado es pequeño en comparación a los valores que se usará habitualmente para las mediciones.

N	leapfrog	Ruth
4	16,1	16,9
8	18,1	19,1
16	21,6	$23,\!3$
32	27,4	$_{30,0}$
64	44,1	51,1

Cuadro 3.1: Tiempos de ejecución promedio (en segundos) para cada método, utilizando los parámetros de las demás simulaciones y variando N. Se ha empleado un paso de tiempos $\Delta t = 1/8$ y un tiempo total $T_{tot} = 1000$, ambos en unidades de la máquina.

Como era de esperar, el método de Ruth tiene una mayor precisión numérica, pero resulta más lento que el leapfrog. Aunque no se especificará, se va a utilizar este primer método para la mayoría de simulaciones, dado que se lleva a cabo en un tiempo manejable y produce mejores resultados numéricos. Sin embargo, el método leapfrog será el favorito para simulaciones más largas, salvo que se observe en la práctica que el error acumulado sea alto.

Pruebas de Aspectos Cualitativos de los Métodos

Para terminar con el capítulo, se añade algunas simulaciones que ejemplifiquen y comprueben las propiedades geométricas de los métodos leapfrog y de Ruth. En la tabla 3.2 puede verse el resultado de correr una simulación inicial y la inversa temporal (o la inversa de caminos) para los dos métodos simplécticos. Se muestra los valores iniciales $q^{(0)}$ y también los valores finales que han de ser próximos a estos para todos los casos.

	$q^{(0)}$
condiciones iniciales	(0, 1, 2, 3, 3, 2, 1, 0)
leapfrog (sim. temp.)	(9,1246e - 16, 1,0000, 2,0000, 3,0000, 3,0000, 2,0000, 1,0000, -2,2517e - 15)
Ruth (sim. temp.)	(6,9504e-5,0,99999,2,0000,2,9999,2,9999,2,0000,0,99999,6,9504e-5)
leapfrog (sim. esp.)	(9,1246e - 16, 1,0000, 2,0000, 3,0000, 3,0000, 2,0000, 1,0000, -2,2517e - 15)
Ruth (sim. esp.)	(6,9501e-5,0,99999,2,0000,2,9999,2,9999,2,0000,0,99999,6,9501e-5)

Cuadro 3.2: Resultados de aplicar al estado inicial $q^{(0)}$ (con $p_j^{(0)}$ nulos) los métodos indicados y después, el método de regreso por simetría temporal y por simetría de caminos. Se muestra el estado final obtenido tras ambas simulaciones para los distintos casos, que debe coincidir con el estado inicial $q^{(0)}$. Los valores de los p_j tras ambas iteraciones, que han de ser 0, se aproximan a un orden similar al que lo hacen q_1 y q_8 a 0. Se ha utilizado los parámetros N = 8, $\kappa = m = 1$, $\alpha = \beta = 0$ (caso lineal), $\Delta t = 1/8$ y $T_{tot} = 125$, con los tiempos dados en unidades arbitrarias de la máquina.

Como se esperaba, se obtiene unos valores finales muy próximos a los iniciales. Destaca el hecho de que el método de menor orden sea el que añada un menor error. Los métodos utilizados son reversibles temporalmente y también reversibles por caminos, así que el error que se observa se debe a errores de truncamiento de la máquina. De esta forma tiene sentido que, como el método de mayor orden conlleva más operaciones, acumulará mayor error de redondeo.

Veamos otra prueba del buen comportamiento de estos métodos para la reversibilidad temporal y la de caminos. En la figura 3.4 se muestra unos caminos de ida y vuelta calculados, uno con el método leapfrog y por reversión temporal, y el otro con el método de Ruth y por reversión de caminos. Tan solo se muestra una porción del camino para que pueda apreciarse que son diferentes aunque parecidos.



Figura 3.4: Se muestra una parte de los caminos que siguen algunos de los pares de simulaciones regular e inversa utilizadas en la tabla 3.2. A la izquierda vemos la simulación de reversibilidad temporal con el método leapfrog, y a la derecha la simulación de reversibilidad de caminos con el método de Ruth. Se ha ampliado el paso de tiempos a $\Delta t = 1/100$ en las unidades de tiempo arbitrarias de la máquina.

Para finalizar, veamos una comparación entre un método de simpléctico frente a otro que no lo es para ver si se preserva el volumen del espacio de fases. Se considera el sistema de un oscilador armónico perturbado con un término cuadrático en las fuerzas, como el sistema FPU pero con N = 1. Se escoge este caso dado que el espacio de fases tiene dimensión 2 y puede representarse gráficamente.



Figura 3.5: Estados inicial y final tales que los estados iniciales vienen dados como la parametrización discreta de un círculo en el espacio de las variables p y $m\omega 1q$, y los estados finales vienen calculados por un método de integración. A la izquierda se utiliza el método de Ruth, y a la derecha, el método de Euler explícito. El sistema considerado equivale a la cadena α -FPU con N = 1 y $\alpha = 1/4$.

En la figura 3.5 se muestra un conjunto de estados iniciales que parametrizan a un círculo, y también los estados finales asociados a la evolución del sistema por los métodos de Ruth y de Euler. Nótese que el sistema considerado es conservativo y que, por lo tanto, podemos suponer que los puntos del interior del círculo de condiciones iniciales se mantendrán en el interior del contorno de puntos finales, ya que de lo contrario se cruzaría su trayectoria con la de algún otro punto. Se observa que el círculo de estados iniciales conserva su área con el método simpléctico, y que no ocurre así para el otro método. Aunque no se ha dado en este caso, podría ocurrir, para el método simpléctico, que el círculo de estados finales se achatase, pero que siga conservando el área del círculo inicial.

Capítulo 4

Resultados sobre la Cadena FPU.

En este capítulo se lleva a cabo un estudio experimental sobre la cadena α -FPU y la cadena β -FPU. Reproduciremos, en la medida de lo posible, los resultados que hemos anticipado durante la introducción y que son básicos dentro de la fenomenología de la cadena FPU. Para los análisis que sean particulares de un caso, tomaremos los parámetros originales de las simulaciones del experimento FPU, o en su lugar, los de una versión equivalente que introduciremos. En todo caso utilizaremos la cadena FPU sin las condiciones de contorno periódicas. También, los análisis que realicemos serán sobre estados iniciales donde toda la energía está en el modo fundamental salvo en casos concretos. Algunas especificaciones sobre la manera en que se han obtenido los resultados son que los promedios temporales se han tomado como el promedio de todos los datos calculados y que se ha fijado los valores $\kappa = m = 1$ en todo momento.

La bibliografía para este capítulo es muy extensa y, o bien se irá mencionando en el texto, o bien quedará referida a lo que ya se introdujo previamente en el primer capítulo.

4.1. Recurrencia y Superrecurrencia FPU.

En esta sección se reproducirán los resultados del trabajo de Fermi, Pasta y Ulam, [FPU, 1955], y también la superrecurrencia en la cadena FPU, reportada originalmente en [TuMe, 1972]. En primer lugar, veremos la recurrencia en la cadena α -FPU y la cadena β -FPU con los parámetros originales. Después, se mostrará que los promedios de las energías de los modos se estabilizan en unas cantidades que nada tienen que ver con una equipartición de la energía. Para finalizar, reproduciremos el resultado de Tuck y Menzel sobre una recurrencia de las recurrencias FPU: la superrecurrencia FPU.

Recurrencia FPU

En este espacio se van a recrear las simulaciones originales de la cadena FPU y a comentar los resultados. No reproduciremos todas las figuras que se muestran en [FPU, 1955], tan solo las más significativas y con relación a sus resultados fundamentales. Hablamos de las simulaciones de las cadenas α -FPU y β -FPU con un tamaño N = 32. Se escoge un estado inicial en el que la cadena describe medio periodo de la función seno, es decir, con toda la energía inicialmente en el primer modo normal. Esto resulta en las siguientes condiciones iniciales, definidas para cada $j = 1, \ldots, 32$:

$$q_j^{(0)} = \sin(j\pi/(N+1)), \qquad p_j^{(0)} = 0.$$
 (4.1)

Tomando todo esto en consideración, puede calcularse la energía del sistema en cada caso:

$$E_{\alpha} = 0,074713, \qquad E_{\beta} = 0,076743, \qquad (4.2)$$

donde el subíndice α se refiere a que es la energía de la cadena α -FPU, y de la misma manera para β . En lo que sigue, se distinguirán los resultados de uno y otro sistema por el subíndice. Recordemos que no se indican las unidades de las magnitudes porque todas ellas se muestran en unidades arbitrarias con las que trabaja la máquina. Puede pensarse que todas ellas tienen unidades del sistema internacional. Con las condiciones dadas y tomando los valores $\kappa = m = 1$, simulamos las cadenas α -FPU y β -FPU originales.



Figura 4.1: Se muestran varios ciclos de la recurrencia FPU en la cadena α -FPU a la izquierda, y a la derecha puede verse el primer ciclo en detalle. Se han utilizado los parámetros del experimento FPU, es decir, N = 32, $\alpha = 0.25$ y un estado inicial descrito por las igualdades 4.1.



Figura 4.2: A la izquierda se muestran varios ciclos de recurrencia de la cadena β -FPU y a la derecha se muestra el primero de tales ciclos en detalle. Se han utilizado los parámetros del experimento FPU, que son N = 32, $\beta = 8$ y un estado inicial descrito por las igualdades 4.1.

En las figuras 4.1 y 4.2 vemos varios ciclos de la recurrencia FPU de cada una de las cadenas, y también el primero de los ciclos en detalle. Se muestran tan solo las energías de los modos con menor frecuencia, ya que son los que acumulan la mayor parte de la energía del sistema durante todo el ciclo. En general, sucede que todos los modos ganan algo de energía en algún momento del ciclo, salvo en el caso de la cadena β -FPU en la que los modos pares no obtienen energía en absoluto y los valores de sus energías son comparables a la magnitud de los errores por redondeo. La causa de esto es la simetría en el hamiltoniano de la cadena β -FPU que comentamos en el capítulo anterior, que provoca que el sistema evolucione simétricamente. Es decir, un estado inicial simétrico respecto del centro de la cadena lleva a un estado ulterior igualmente simétrico, y es que los modos normales con r impar son simétricos en este sentido, mientras que aquellos con r par son antisimétricos. Además de que la energía está localizada en unos pocos modos normales, esta no se reparte igualmente entre ellos sino que va compartiéndose entre los distintos modos, y estos van describiendo una serie de máximos que más o menos se repiten en los ciclos siguientes. El inicio de cada ciclo de recurrencia FPU lo marca un máximo en la energía del modo fundamental.

Podemos hacer algunas medidas. Por ejemplo, tras el primer ciclo de recurrencia FPU, el modo funda-

mental experimenta una pérdida relativa de energía de 0,019 en la cadena α -FPU, y de 0,004 en la β -FPU. También podemos medir el tiempo que tarda en completarse el primer ciclo de la recurrencia FPU:

$$t_{\alpha} = 153, 4T_1, \qquad \qquad t_{\beta} = 74, 76T_1,$$

que lo mostramos en unidades del periodo del modo fundamental $T_1 = 2\pi/\omega_1$, que puede aproximarse por $T \approx 2N$ cuando $N \gg 1$. En lugar del tiempo de duración del ciclo de recurrencia podemos hablar del periodo de la recurrencia FPU en el sentido siguiente. Habitualmente se suceden muchos ciclos de recurrencia FPU (no siempre) y además aparecen de manera casi periódica. Por lo tanto, podemos llamar periodo de la recurrencia FPU al promedio de las duraciones de todos estos ciclos. Entonces, podemos obtener las siguientes estimaciones de los periodos de la recurrencia FPU:

$$T_{\alpha} = 155,0T_1,$$
 $T_{\beta} = 74,55T_1.$

Los valores de los promedios son muy similares, con una diferencia relativa de 0,015 a lo sumo. Esto nos dice que los ciclos de recurrencia FPU, si bien no duran lo mismo, sí que tienen una duración similar.

Promedios de Energías en el Experimento FPU

Inicialmente, Fermi, Pasta y Ulam esperaban que el sistema FPU evolucionase hacia la equipartición de energía, es decir, hacia un estado estacionario donde las energías de los modos permanecen iguales en promedio. A fin de comprobarlo, trataron de representar gráficamente los sucesivos promedios temporales de la energía cinética de los modos que adquirían una energía significativa. Se ha reproducido este mismo resultado, pero utilizando las energías totales de los modos en lugar de usar solo sus energías cinéticas.



Figura 4.3: Energías promedio de los modos normales en función del tiempo. A la izquierda, la cadena α -FPU original de la figura 4.1, y a la derecha, la cadena β -FPU original de la figura 4.2.

En la figura 4.3 se han representado los promedios temporales de las energías de los modos más bajos de las cadenas α -FPU y β -FPU vistas en el apartado previo. Recordemos que estos promedios se toman como la media de los valores medidos desde el inicio. Se observa que lejos de darse la equipartición de la energía, ambos sistemas evolucionan hacia otro tipo de configuración. Hoy en día se sabe que la cadena FPU llega a la equipartición de la energía tras un cierto tiempo. Sin embargo, no puede ignorarse que antes de llegar a ese estado final los promedios de las energías se estabilizan en unos valores concretos que nada tienen que ver con la equipartición de la energía. En este punto, la cadena FPU se encuentra en el estado metaestable.

Superrecurrencia FPU

En este apartado se reproducen las simulaciones de Tuck y Menzel sobre la superrecurrencia de la cadena FPU. Recuperando los valores de las simulaciones originales (véase las figuras 4.1 y 4.2), se lleva a cabo un par de simulaciones más largas con el fin de observar esta superrecurrencia.



Figura 4.4: Se muestra la energía del modo fundamental en función del tiempo para las cadenas α -FPU y β -FPU de las figuras 4.1 y 4.1, a izquierda y derecha respectivamente. Cada máximo local de las figuras corresponde con un ciclo de recurrencia FPU, y puede verse un ciclo de superrecurrencia en ambos casos.

En la figura 4.4 se observa que pasados muchos ciclos de la recurrencia FPU, el modo fundamental empieza a recobrar poco a poco una mayor porción de la energía inicial. El punto en el que esta sucesión de picos del estado fundamental llega a su máximo, se considera el fin de un ciclo de superrecurrencia. Al igual que con la recurrencia, sucede que si se sigue simulando la cadena por un tiempo mayor, esta aparecerá sucesivas veces aunque en este caso los ciclos tienen duraciones muy distintas en general. Además, está el hecho de que en la cadena β -FPU se pierde el comportamiento de las recurrencias mucho antes de llegar a la termalización, como veremos más adelante.

4.2. Herramientas para la Caracterización de Macroestados.

Dedicaremos este espacio a describir una serie de herramientas y procedimientos que podremos utilizar a la hora de caracterizar a los macroestados de la cadena FPU. En particular hablaremos del espectro FPU, que no es otra cosa que la representación de los promedios temporales de las energías de los modos, y veremos que se cumple la ley exponencial (1.8) que se introdujo en el primer capítulo. Además, el espectro nos permitirá ver como evolucionan los promedios de las energías en diferentes escalas de tiempo del sistema, pudiendo estimar de manera muy tosca el tiempo de termalización. Para poder hacer esto de manera más precisa, introduciremos un procedimiento basado en la función de entropía S (1.5).

Evolución de las Cadenas FPU Originales

En este apartado abordaremos la cuestión de cómo se comportan las cadenas α -FPU y β -FPU originales hasta que alcanzan la equipartición de la energía. Es evidente que en cierto momento debe darse una transición desde el macroestado inicial hasta aquel en el que se tiene la equipartición de la energía, ya que para que cambien los promedios de las energías de los modos debe de cesar la recurrencia FPU.

En la figura 4.5 se ha representado la evolución de la cadena α -FPU durante un tiempo del orden de 10⁶ veces el periodo fundamental T_1 de la cadena. Podemos observar que la cadena sigue mostrando el mismo comportamiento de recurrencia. Esto implica que la mayor parte de la energía del sistema permanece confinada en los modos de frecuencias bajas por un tiempo muy largo, y también que no se ha dado la termalización del sistema. Acompañamos esta gráfica con la función S (1.5), que comentaremos más adelante y que nos dice que efectivamente no se ha dado la equipartición de la energía.

Se representa el caso de la cadena β -FPU original en la figura 4.6, y también otra cadena β -FPU con el mismo valor de N = 32. Hemos dibujado el primer modo impar y el primer modo par para examinar el fenómeno siguiente. En ambos casos vemos que al principio solo adquieren energía los modos impares



Figura 4.5: A la izquierda se muestra la evolución de la cadena α -FPU de la figura 4.1 para un tiempo relativamente alto $(2 \cdot 10^6 T_1)$. A la derecha se tiene la función de entropía S (1.5) para el mismo sistema simulado hasta la misma escala de tiempos.



Figura 4.6: A la izquierda, una simulación de la cadena β -FPU con los datos de la figura 4.2, y lo mismo puede verse a la derecha, pero tomando los valores $\beta = 0.613944$ y E = 1.

más bajos, aunque únicamente representamos el modo fundamental. Pasados unos 600 periodos del modo fundamental, las energías de los modos pares se vuelven significativas y el comportamiento recurrente cesa poco después. Como se verá en la sección siguiente, este par de sistemas son equivalentes en el sentido de que deberían comportarse igual salvo por un reescalamiento de las energías. No obstante, vemos que se comportan de manera diferente cuando los modos pares adquieren cierta parte de la energía del sistema. Esto último es efecto de los errores por redondeo de la máquina, dado que la simetría de la cadena β -FPU hace que los modos pares aumenten su energía.

El Espectro FPU

La representación de los promedios temporales vista en la figura 4.3 es ineficiente si consideramos que estamos ante un macroestado que se mantiene por un largo tiempo. Una forma más limpia de hacerlo es mediante el espectro FPU, nombrado así en concordancia con el uso de la transformada discreta de Fourier (DFT) para encontrar los modos normales en el caso con condiciones de contorno periódicas. El espectro FPU son las energías promedio calculadas para algún tiempo y representadas frente a los distintos índices r de los modos. De este modo, resulta fácil añadir las energías para el resto de modos



con una escala logarítmica. Analicemos los espectros FPU de las simulaciones originales.

Figura 4.7: A la izquierda vemos el espectro FPU de la cadena α -FPU original (ver figura 4.1) para varios órdenes de magnitud del tiempo en unidades del periodo fundamental T_1 . A la derecha se muestra el espectro FPU para un par de órdenes de magnitud sucesivos, en los que se realiza un ajuste exponencial.



Figura 4.8: Tomando la cadena β -FPU de la figura 4.2 se muestra, a la izquierda, su espectro FPU para distintos órdenes de magnitud del tiempo en unidades del periodo fundamental T_1 . A la derecha puede verse el espectro FPU a tiempo T_1 junto con un ajuste exponencial para los modos impares.

Para el caso de la cadena α -FPU (figura 4.7), observamos que el espectro FPU describe una recta en escala logarítmica, cumpliendo con la ley exponencial (1.8). El hecho de que para el tiempo T_1 no se ve una recta completa se debe a los errores por redondeo, ya que los valores fuera de la recta son de órdenes de magnitud comparables. Nos fijamos en que los espectros hasta el orden de 10^3T_1 son rectas en la escala exponencial que de cierta manera se estabilizan en una recta. Los espectros siguientes describen aproximadamente esa misma recta pero con valores algo diferentes. Considerando la discusión teórica del trabajo [LoPa, 2006],¹ diremos que el tiempo en el que se estabiliza esta pendiente es el tiempo de formación del estado metaestable de la cadena α -FPU.

Pasamos a la figura 4.8, la cual contiene los espectros de la cadena β -FPU original. En primer lugar,

¹No cubriremos el apartado teórico aquí, pero esencialmente nos referimos a la correspondencia que muestra entre la formación de la onda de choque en la solución continua que modula a la cadena α -FPU con la aparición de ondulaciones en la recta exponencial que pueden verse a partir de un orden de magnitud de 10^4T_1 .

observamos que la termalización ha tenido lugar en un tiempo cuyo orden de magnitud es 10^4T_1 . Observamos que los modos pares adquieren energía aunque por la condición inicial simétrica no debería ser así y debería de alcanzarse la equipartición, si acaso, únicamente entre los modos impares.

Entropía de la Información como Marcador de la Termalización

La función S (1.5) definida a partir de la entropía de la información, como ya se anticipó, sirve como un buen indicador de la termalización de un sistema. Tratemos de entender, de manera más visual, las propiedades que ya hemos visto sobre esta función con el siguiente ejemplo.



Figura 4.9: Entropía S calculada en función de las energías instantáneas de los modos y representada frente al tiempo para las cadenas α -FPU (izquierda) y β -FPU (derecha) de las figuras 4.1 y 4.2.

En la figura 4.9 mostramos las funciones S que toman como variables las energías de los modos en lugar de sus promedios temporales, todo esto en relación con los sistemas estudiados en las figuras 4.1 y 4.2. Observamos que como en el estado inicial toda la energía se encuentra en un único modo, entonces el valor de S es máximo al inicio. Seguidamente, vemos que los valores de S oscilan de manera sincronizada con el modo fundamental (véase la figura 4.4 de la superrecurrencia). Esto es porque en cada subida de energía del modo fundamental, este es muy dominante respecto del resto y eso eleva el valor de S. En general, el valor de S no baja de 0,5 y esto se debe a que la energía está localizada en unos pocos modos normales. Notemos como el valor de S es relativamente alto cuando las distribuciones de energías no son equitativas. Ahora, examinemos el valor de la función S para la cadena β -FPU durante todo el proceso de termalización.

Se ha querido comparar la diferencia entre tomar como variables las energías de los modos y tomar sus promedios temporales. Por la propia definición de S, es evidente que el promedio temporal de $S(E_1, \ldots, E_N)$ difiere de $S(\overline{E}_1, \ldots, \overline{E}_N)$. Esto es debido a que la cadena no está estática en un microestado donde las energías de los modos son siempre idénticas, sino que lo son en promedio. Por este motivo, $S(\overline{E}_1, \ldots, \overline{E}_N)$ se aproximará mucho más a 0. Esto es muy conveniente porque nos permite dar un criterio objetivo para tomar el tiempo de termalización. En nuestro caso, diremos que el tiempo de termalización se alcanza en el instante en el que $S(\overline{E}_1, \ldots, \overline{E}_N) = 0,001$, y con esto hemos medido un tiempo de termalización para la cadena β -FPU original de $t_{term,\beta} = (1,8 \cdot 10^5)T_1$. Observemos una diferencia sustancial entre la función S de la cadena α -FPU de la figura 4.5 con la función S de la β -FPU (figura 4.10 a la derecha), y es que en el primer caso la entropía se estabiliza en un valor durante todo el estado metaestable, y en este sentido, no puede evidenciarse que tal cosa ocurra para la cadena β -FPU. Una posible razón es la presencia de los modos pares, los cuales ganan energía gradualmente hasta llegar a la termalización, como puede verse en el espectro FPU de la figura 4.8.



Figura 4.10: Entropía S de la cadena β -FPU de la figura 4.2 simulada durante un tiempo suficiente como para alcanzar la equipartición de la energía. A la izquierda se calcula en función de las energías instantáneas de los modos y a la derecha, en función de los promedios temporales de estas energías. Nótese la diferencia entre la escala lineal a la izquierda y logarítmica a la derecha.

4.3. Parámetros de la Cadena FPU.

En esta sección hablaremos sobre los parámetros que caracterizan a cada una de las cadenas FPU que se comportan cuantitativamente diferentes, en contraposición con los parámetros del hamiltoniano (2.7) que son redundantes en ese sentido. Probaremos la existencia de un parámetro que caracteriza el comportamiento de sistemas FPU con un mismo tamaño N. Tras esto, discutiremos sobre la aparición de recurrencia en función de los parámetros del sistema.

Parámetros Redundantes y Sistemas FPU Equivalentes

Consideremos el hamiltoniano (2.7) de la cadena FPU, y veamos qué parámetros son redundantes. Ya comentamos en su momento que m y κ se toman como la unidad porque supone un coste computacional menor y porque no afecta a los resultados salvo en la escala de las unidades. Nótese que cambiar m por m', por ejemplo, es como estudiar el hamiltoniano original pero con un cambio de variables dado por p' = (m/m')p, y en definitiva es el mismo sistema pero reescalado. Puede darse un argumento similar para κ . Lo que haremos a continuación será utilizar esta idea para tratar de encontrar familias de sistemas que se comporten de manera idéntica, salvo en un reescalamiento de las unidades. Es decir, dado un N fijo, consideremos un hamiltoniano del tipo (2.7) con $\beta = 0$, el cual denotaremos por $H_{lin} + \alpha H_{per}$ con H_{lin} el hamiltoniano lineal (2.7) con $\alpha = \beta = 0$. Sus ecuaciones del movimiento para unas variables q, p vienen dadas por las ecuaciones 2.6. Ahora, aplicamos la transformación de coordenadas $q = \gamma q', p = \gamma p'$ con γ una constante real no nula. El resultado son las siguientes ecuaciones del movimiento:

$$\begin{split} \dot{q}'_{j} &= p'_{j} \\ \dot{p}'_{j} &= -\kappa (2q'_{j} - q'_{j+1} - q'_{j-1}) - (\alpha\gamma) \left[(q'_{j} - q_{j-1})^{2} - (q'_{j+1} - q'_{j})^{2} \right], \end{split}$$

para cada j = 1, ..., N. Se han obtenido las ecuaciones del movimiento de otro sistema α -FPU cuya constante del término de perturbación es $\alpha' = \alpha \gamma$. Queremos que ambos sistemas se comporten igual, y para ello no solo es necesario que tengan las mismas ecuaciones del movimiento, sino que las condiciones iniciales en ambos tienen que ser en algún sentido compatibles. Para hacer esto, es necesario que sus energías coincidan y para ello aplicamos las transformaciones al hamiltoniano:

$$H_{lin}(q,p) + \alpha H_{per}(q,p) = \gamma^2 H_{lin}(q',p') + \alpha \gamma^3 H_{per}(q',p') = \gamma^2 [H_{lin}(q',p') + \alpha' H_{per}(q',p')],$$

y de este modo se obtiene la condición:

$$\alpha^2 E = \alpha'^2 E',\tag{4.3}$$

donde E es la energía del sistema original y E' la del transformado para algún estado inicial particular. Además, notemos que por la forma que tienen las transformaciones de coordenadas, se sigue las mismas relaciones de proporcionalidad para las energías de los modos (incluso para la potencial y cinética individualmente), por lo que esta condición es además suficiente para que los sistemas se comporten cuantitativamente igual salvo por un reescalamiento en las energías por un factor γ^2 . Este argumento puede adaptarse al caso de la cadena β -FPU y se obtendría la condición necesaria y suficiente siguiente:

$$\beta E = \beta' E'. \tag{4.4}$$

Pasamos a representar varios sistemas equivalentes según la caracterización que hemos dado por las ecuaciones (4.3) y (4.4). En primer lugar, haremos una normalización de energías para las cadenas α -FPU y β -FPU originales, en el sentido de que calculamos unos parámetros α_{norm} y β_{norm} que diremos normalizados mediante las ecuaciones (4.3) y (4.4):

$$\alpha_{norm} = 6,833 \cdot 10^{-2}, \qquad \beta_{norm} = 6,139 \cdot 10^{-1}.$$



Figura 4.11: Simulaciones de las figuras 4.1 y 4.2, pero cambiando la energía del sistema por E = 1 y los parámetros de la perturbación por sus correspondientes normalizados α_{norm} y β_{norm} .



Figura 4.12: Se muestran un par de sistemas equivalentes de la cadena α -FPU con N = 37 y con un estado inicial caracterizado por las relaciones $E_{14} = 3E_{32}$ y $E_{32} = 7E_{21}$ y por tener $p^{(0)} = 0, \ldots, 0$. El de la izquierda utiliza los valores E = 1, $\alpha = 1$, y el de la derecha toma sus equivalentes E = 4 y $\alpha = 1/2$.

Como era de esperar, la cadena α -FPU se comporta de manera idéntica a la original (figura 4.11), y también podemos decir lo mismo para la cadena β -FPU. En la figura 4.12 se tiene otro ejemplo de un par de sistemas α -FPU con parámetros que satisfacen las relaciones (4.3) y (4.4). Observamos que se comportan idénticamente. Un ejemplo más viene dado en la figura 4.6, aunque en este caso no se observa un comportamiento idéntico debido a lo que ya se discutió allí.

Parámetros en la Aparición de la Recurrencia FPU

Las primeras respuestas al experimento FPU barajaban una elección patológica de los parámetros del sistema. En concreto, se hablaba de que la elección del tamaño N del sistema podía ser la causa de la recurrencia FPU. En [FPU, 1955], el tamaño del sistema se escoge una potencia de 2 con el fin de simplificar los cálculos, cosa que fue necesaria dada la capacidad de la computadora de la que se disponía entonces. J. Ford señaló, pocos años después de finalizar el experimento FPU, que las resonancias internas debían jugar un papel importante en el comportamiento del sistema, y argumentó que únicamente una elección de N primo o una potencia de 2 podía dar lugar a la recurrencia FPU. En 1961, Tuck y Menzel aportaron la primera prueba experimental de que efectivamente se tenía recurrencia para la cadena α -FPU con N = 17 (primo). En aquel entonces, desmentir la afirmación de Ford no era tan sencillo como puede resultar a día de hoy. A nosotros nos tomará unos sencillos ejemplos ver que puede obtenerse la recurrencia FPU para cualquier valor de N, al menos dentro del rango de valores en el que puede practicarse la simulación. En la figura 4.13 pueden verse tanto la simulación de Tuck y Menzel para N = 17 como otro par de simulaciones con un N que no es potencia de 2 ni primo.



Figura 4.13: Se muestran varios sistemas FPU con un estado inicial dado por el modo fundamental con energía 1. El de la izquierda es un α -FPU con N = 17 y $\alpha = \alpha_{norm}$. El del centro es también un α -FPU normalizado, pero esta vez con N = 42. El de la derecha es una cadena β -FPU con N = 105 y $\beta = \beta_{norm}$.

Otra objeción al trabajo de Fermi, Pasta y Ulam era que el estado inicial escogido puede jugar un papel determinante en la aparición de la recurrencia. Notemos que estamos hablando sobre si aparece o no la recurrencia FPU, y no sobre si ciertos estados iniciales llevan a la formación de un conjunto de estados en el que se mantiene la mayor parte de la energía, como ocurre si se escoge el modo fundamental como el estado inicial. En el propio reporte del experimento FPU, puede verse unas pruebas con estados iniciales diferentes de aquel en el que la energía se encuentra en el modo fundamental.

En la figura 4.14 se incluyen varias simulaciones con estados iniciales diferentes. La gráfica de la izquierda nos muestra el caso de una función diente de sierra, que es una función simétrica respecto del centro de la cadena que Fermi, Pasta y Ulam utilizaron en su reporte original. Con el ejemplo de la derecha, vemos que la simetría tampoco juega ningún papel a la hora de si aparece o no la recurrencia, pues hemos dado a la cadena un estado inicial antisimétrico y aún puede verse una cierta recurrencia en las energías de los modos adyacentes a aquel que tenía la energía inicial. Notemos que la gráfica comienza en el tiempo $90T_1$, ya que hasta este punto se tiene que casi toda la energía permanece en el modo inicial.

Sobre la cuestión de si los estados iniciales afectan en la aparición de recurrencia (nos referimos a estados con una energía moderada), merece la pena mencionar el trabajo [BaPo, 2005], en el que se habla de un



Figura 4.14: Se tienen un par de sistemas β -FPU con $\beta = 1/2$. El de la izquierda tiene N = 26 y su estado inicial es una función diente de sierra con energía E = 0.75. El de la derecha, en cambio, tiene N = 23 y un estado inicial antisimétrico en el que toda la energía está en el modo η_{22} .

fenómeno conocido como Blow-Up y en el que sus autores ofrecen una explicación teórica basada en la forma normal de Birkhoff. La tesis principal que sostienen es que la aparición de recurrencia en las cadenas α -FPU, β -FPU y γ -FPU (esto es, tomando términos con exponente 5 en el potencial) no dependen de la distribución inicial de las energías de los modos, es decir, que es indiferente meter toda la energía en el modo fundamental que distribuirla de cualquier otra forma. Además, para la cadena FPU donde el término no lineal del hamiltoniano va con exponente 6, esta propiedad se pierde; y para un exponente 7 o mayor, estos autores alegan que no se da la recurrencia en ningún caso.

Llegados a este punto, ya hemos visto qué condiciones no influyen en la aparición de recurrencia FPU. Una condición que sí que influye es la energía total del sistema. Ocurre que cuando la energía de un sistema FPU es relativamente alta, entonces no aparece la recurrencia y sí que se observa una rápida tendencia hacia la equipartición de la energía. En la subsección precedente, ya vimos la relación entre el parámetro de la perturbación y la energía del sistema que ha de darse para que un par de sistemas se comporten idénticamente. Entonces, da lo mismo aumentar la energía que aumentar α o β . Sin embargo, esta energía límite es diferente para distintos tamaños N de un sistema FPU. Izrailev y Chirikov fueron los primeros en hablar del llamado umbral de estocasticidad, que son los valores de las energías críticas para distintos tamaños de los sistemas FPU a partir de las cuales no aparece la recurrencia, sino que se tiene una rápida tendencia hacia la equipartición de la energía.

4.4. Tiempos Característicos de la Recurrencia.

En esta sección vamos a estudiar los tiempos de recurrencia y de superrecurrencia de la cadena FPU. Dado que la recurrencia de estados aparece de manera casi periódica, hablaremos del periodo de recurrencia FPU en lugar del tiempo de recurrencia FPU, que es el tiempo que tarda en completarse el primer ciclo de la recurrencia. Suponiendo que se tiene sucesivos ciclos de la recurrencia FPU de forma indefinida y llamando t_k al tiempo comprendido desde el inicio del movimiento hasta el final del k-ésimo ciclo de recurrencia FPU, definimos el periodo de la recurrencia FPU como la cantidad siguiente:

$$T_{FPU} = \lim_{k \to \infty} \frac{t_k}{k},$$

que puede estimarse como el promedio de los tiempos de sucesivos ciclos. Esta misma idea se traslada a la superrecurrencia, pero en este caso, veremos que no hay casi periodicidad en los ciclos. Haremos este estudio para la cadena α -FPU, dado que la β -FPU resulta problemática a la hora de medir estos periodos de recurrencia.

Periodo de la Recurrencia FPU

En este apartado se ponen a prueba las relaciones de Zabusky (1.6) y de Toda (1.7) para la cadena α -FPU. Llevamos a cabo dos tandas de medidas de los periodos de la recurrencia FPU para sistemas α -FPU con un estado inicial donde toda la energía la tiene el modo fundamental, la energía total del sistema es 1, y se varía el parámetro N fijando $\alpha^2 E$ en el valor del sistema α -FPU original (véase la figura 4.1).



Figura 4.15: Representación del logaritmo natural de los periodos de recurrencia FPU en unidades del periodo fundamental frente al logaritmo del tamaño N. Se miden unos sistemas α -FPU con estado inicial el modo fundamental, energía del sistema E = 1 y con $\alpha = \alpha_{norm}$ a la izquierda y $\alpha = 1/3$ a la derecha. Los valores de N van desde 24 a 256 a la izquierda y de 6 a 20 a la derecha.

Si nos fijamos, el denominador de la ecuación (1.6) es una función del parámetro $\alpha^2 E$, es decir que $\sqrt{a\alpha} = \sqrt[4]{\alpha^2 E}$, y entonces podemos simplificar (1.6) como la siguiente ecuación de ajuste:

$$T_{FPU}/T_1 = CN^{3/2}, (4.5)$$

donde C es una constante real. Para el caso de la ecuación (1.7) podemos escribir lo mismo si consideramos la aproximación $T_1 \approx 2N$ para $N \gg 1$. Las medidas de los periodos de recurrencia para la cadena α -FPU pueden verse en la figura 4.15, donde se ha utilizado la constante $\alpha^2 E$ del sistema FPU original en la de la izquierda y $\alpha^2 E = 1/9$ en la de la derecha. Se ha hecho un ajuste a la ecuación 4.5, resultando en fracaso para ambos casos. Tras comprobar que los resultados se han obtenido de la manera que consideramos correcta, se ha optado por realizar un ajuste a una ecuación del tipo $T_{FPU}/T_1 = C_1 N^{C_2}$. Se ha observado que en ambos casos el valor de C_2 es muy próximo a 5/4, y por lo tanto, se ha decidido finalmente ajustar los datos a una relación del tipo siguiente:

$$T_{FPU}/T_1 = CN^{5/4}$$

con C una constante positiva. En la figura 4.15 puede comprobarse la bondad de estos ajustes. Se desconoce la causa de esta discrepancia. Por un lado, no se tiene capacidad de comprobar que las ecuaciones (1.6) y (1.7) sacadas de [DPR, 2005] sean fieles a los trabajos originales de Zabusky y de Toda, dado el celo con el que las editoriales se reservan estos documentos de referencia obligada, y tampoco es posible reproducir sus razonamientos porque requieren de un manejo de ciertos temas que exceden a las pretensiones de este escrito. Además, no debe olvidarse que los citados trabajos se desarrollaron en una época relativamente temprana de la aparición de [FPU, 1955] y que en la actualidad pueda existir alguna revisión de estos resultados que desconocían Dauxois y sus colaboradores, y con la que tampoco nos hemos cruzado.

También se han querido medir los periodos de recurrencia para la cadena β -FPU, pero no se ha podido conseguir una cantidad de medidas suficiente con un valor βE fijo como para tratar de encontrar la relación entre los periodos de recurrencia y N. La causa es el fenómeno que vimos reflejado en la figura 4.6, que es el hecho de que la cadena β -FPU pierde la recurrencia enseguida.² Es cierto que se completa

²Nos referimos aquí a que se pierde el perfil de recurrencia FPU inicial y no a que se destruye el estado metaestable, el cual ya vimos que perdura hasta tiempos del orden de $10^5 T_1$ en la figura 4.10.



Figura 4.16: Varias simulaciones de sistemas β -FPU con $\beta = \beta_{norm}$ y N = 16, 20, 24 de izquierda a derecha. El estado inicial es una mezcla del modo fundamental y el segundo modo, con la misma energía ambos y una energía total de 1. Las barras verticales negras muestran las casi recurrencias de estados.

algún ciclo de la 'recurrencia', pero si no se ven varios ciclos, no puede decirse que este sea propiamente el ciclo de una recurrencia y el análisis no tendría sentido. También hemos tratado de estudiar un estado inicial que no sea simétrico, pero no ha sido posible. En la figura 4.16 vemos que para este caso no siempre aparecen recurrencias, pero es que tampoco son periódicas.

Periodo de la Superrecurrencia FPU

En este apartado veremos los tiempos de superrecurrencia medidos para los sistemas α -FPU que se describen en la figura 4.15. Dadas las dificultades a la hora de medir la recurrencia FPU en varios de los sistemas β -FPU, se descarta estudiar la superrecurrencia FPU en general.



Figura 4.17: Representación del logaritmo natural de los tiempos de la superrecurrencia FPU para los sistemas α -FPU de la figura 4.15.

Los resultados pueden verse en la figura 4.17. En el caso de N pequeños, el de la derecha, se han tomado unas medidas que no parecen seguir ningún tipo de correspondencia. A la izquierda hemos representado únicamente N a partir de 24 y observamos que los datos se agrupan en una recta en la escala logarítmica. Se ha realizado un ajuste a la siguiente ecuación:

$$T_{SFPU}/T_1 = CN^{7/4},$$

donde C es una constante positiva y se denota por T_{SFPU} al tiempo del primer ciclo de la superrecurrencia. En general, los ciclos de superrecurrencia no aparecen con una periodicidad precisa.

4.5. Localización de la Energía en la Cadena FPU y Termalización.

En esta sección vamos a tratar el asunto de la localización de la energía en la cadena FPU mientras tiene lugar el estado metaestable. La técnica de análisis que vamos a utilizar es original del artículo [BGG, 2004], en el que se trabaja con una cadena FPU mixta, es decir, con α y β no nulos simultáneamente. Aquí estudiaremos las cadenas α -FPU y β -FPU por separado. Además, veremos si con las medidas que obtengamos para la cadena α -FPU se cumplen las ecuaciones (1.9) y (1.10).

Medida del Paquete de Modos Característico

Aquí trataremos de objetivizar la observación de que la energía de la cadena FPU se encuentra confinada en unos pocos modos de frecuencias bajas durante la recurrencia FPU y si el estado inicial tiene su energía únicamente en estos modos. Definimos las siguientes magnitudes, que llamamos paquetes de modos:

$$\mathcal{E}_r = E_1 + \ldots + E_r,$$

para cualquier $r = 1, \ldots, N$. Si la energía está contenida inicialmente en el modo fundamental, se tendrá que todos los paquetes $\mathcal{E}_1, \ldots, \mathcal{E}_N$ toman el valor de la energía total del sistema, pero gradualmente la energía irá fluyendo entre los modos más bajos, de manera que se tendrá algún r mínimo para el cual el valor de \mathcal{E}_r no haya descendido significativamente en promedio. Dicho \mathcal{E}_r se dice paquete de modos característico del sistema FPU al que corresponda. También se define la frecuencia de corte, que denotamos por ω_{crit} , como la frecuencia por debajo de la cual los modos se encuentran dentro de este paquete. Es decir, con las notaciones que se viene utilizando, la frecuencia de corte sería ω_r .

Definidos estos conceptos, ahora necesitaremos algún marcador experimental para medir este paquete de modos característico de forma sistemática. Para ello utilizaremos las cantidades $\mathcal{E}_1/E, \ldots, \mathcal{E}_N/E$, que siempre se encuentran entre 0 y 1. Diremos que el tiempo de relajación de un paquete \mathcal{E}_r es el mínimo tiempo para el que \mathcal{E}_r/E queda por debajo de un valor de corte que fijaremos en 0,8. Literalmente estamos diciendo que un paquete alcanza su tiempo de relajación si en promedio contiene menos de un 0,8 de la energía total del sistema. Entonces, el paquete de modos característico será aquel que quede justo por encima de este valor de corte durante el estado metaestable. También diremos que el tiempo de formación del estado metaestable, que denotamos por t_{meta} , es el tiempo de relajación del paquete \mathcal{E}_{r-1} si suponemos que el paquete característico es \mathcal{E}_r . Con todo esto, pasemos a estudiar los sistemas α -FPU y β -FPU originales normalizados. Los resultados pueden verse en la figura 4.18.



Figura 4.18: Se han representado algunos de los paquetes de energías para los sistemas α -FPU y β -FPU de las figuras 4.1 y 4.2, respectivamente.

Para el sistema α -FPU se tiene que el paquete característico es \mathcal{E}_4 , mientras que para la β -FPU ha sido \mathcal{E}_3 . Los tiempos de formación del estado metaestable han sido, en cada caso:

$$t_{meta}^{(\alpha)} = 34,22 \ T_1,$$
 $t_{meta}^{(\beta)} = 38,46 \ T_1.$

Frecuencia de Corte y Formación del Estado Metaestable

En este apartado repetimos el procedimiento anterior para toda una colección de sistemas α -FPU con distintos valores de E y N, tomando como estado inicial el modo fundamental y con el valor $\alpha = \alpha_{norm}$. La idea es ver que se cumplan las relaciones cualitativas (1.9) y (1.10).



Figura 4.19: Valores de las frecuencias de corte medidos para una colección de sistemas α -FPU con parámetro α_{norm} y de las posibles combinaciones de los otros parámetros N = 32, 48, 60 y E = 0.5, 1, 2, 4, 8. Se representan las frecuencias de corte en función de las energías específicas y en escala logarítmica.

Realizamos las medidas pertinentes para obtener las frecuencias de corte y las representamos en la figura 4.19. Se ha llevado a cabo el ajuste correspondiente a la ecuación (1.10), que también puede verse en la gráfica y resulta razonable.



Figura 4.20: Tiempos de formación del estado metaestable para los sistemas α -FPU estudiados en la figura 4.19. A la izquierda, se representan estos tiempos frente a la cantidad $N\epsilon^{-1/2} + \epsilon^{-3/4}$ de la ecuación (1.9), y a la derecha, se representan en escala logarítmica frente a las energías específicas ϵ .

Las medidas de los tiempos de formación de los estados metaestables pueden verse representadas en la figura 4.20. La gráfica de la izquierda contiene el ajuste dado por la ecuación 1.9. También hemos encontrado la siguiente ley empírica razonable, cuyo ajuste puede verse a la derecha y sigue la ecuación siguiente:

$$t_{meta} = C \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}$$

donde C es una constante positiva.

Tiempo de Termalización en la Cadena β -FPU

Para concluir este estudio del sistema FPU se pretendió estudiar la termalización en la cadena α -FPU para comprobar que se sigue la ley (1.11), pero esto no es posible debido a los altos tiempos de termalización y a que se maneja un equipo modesto. En su lugar estudiaremos la termalización en la cadena β -FPU, la cual alcanza la equipartición de la energía en un tiempo más bajo. Trataremos de obtener una ley empírica para el tiempo de termalización y discutiremos sobre el carácter de esta termalización en vista de la simetría del hamiltoniano de la cadena β -FPU.

Hemos medido los tiempos de termalización de varios sistemas β -FPU con $\beta = \beta_{norm}$, partiendo de un estado inicial dado por el modo fundamental con energía 1 y tomando diferentes valores de N. En la figura 4.21 se han representado las funciones de entropía S para obtener los tiempos de termalización, y estos se han representado a la derecha frente al tamaño N de cada sistema.



Figura 4.21: A la derecha vemos los tiempos de termalización de unas cadenas β -FPU con $\beta = \beta_{norm}$, estado inicial con energía 1 en el modo fundamental y para los valores N = 16, 20, 24, 28, 32. Las medidas de los tiempos de termalización se han obtenido con las funciones de entropía S representadas a la izquierda, tomando el primer tiempo en el que dichas funciones cruzan el valor 0,001.

En la gráfica de la derecha puede apreciarse un ajuste a una ecuación del tipo $C_1 N^{C_2}$ con C_1, C_2 unas constantes. Hemos tratado de obtener alguna relación empírica parecida a (1.11) pero no ha surtido efecto.

Capítulo 5

Conclusiones.

En líneas generales, hemos visto que en la cadena FPU se forma un primer estado aparentemente estacionario al que llamamos el estado metaestable. Este se forma muy rápido en comparación con su tiempo de vida. Además, cuando el estado inicial viene dado por el modo fundamental, este estado metaestable viene caracterizado también por un paquete de modos característico que contiene a la mayor parte de la energía en promedio. Pasado un largo tiempo en comparación con los periodos de recurrencia FPU y de superrecurrencia FPU, ocurre que el sistema evoluciona hacia otro estado en el que se tiene la equipartición de la energía. En particular, hemos observado que los tiempos de termalización de la cadena β -FPU se encuentran en torno a 10⁵ veces el periodo de su frecuencia fundamental (para ciertos valores de los parámetros). Para la cadena α -FPU no hemos podido observar ningún caso de termalización, debido a las limitaciones de nuestro equipo y a que el tiempo de termalización en este sistema es significativamente mayor.

Hay que destacar el papel de las técnicas que se han empleado para la medida de las cantidades características de los sistemas FPU. El espectro FPU, como se ha visto, describe unas rectas en escala logarítmica. Con el paso del tiempo, estas rectas van disminuyendo su pendiente hasta estabilizarse en una recta específica. Hemos visto que esto sucede para la cadena α -FPU, y se relaciona con la formación del estado metaestable. Otra herramienta de las que hemos visto es la representación gráfica de los paquetes de energía. Esto sirve para establecer un criterio fijo a la hora de estimar el tiempo de formación del estado metaestable y la frecuencia de corte de un sistema FPU concreto. Por último, queda la función S que se define a partir de la entropía de la información y que se utiliza como un indicador del grado de cercanía del sistema a la equipartición de la energía. En su momento se discutió que S debía ser función de los promedios de las energías en lugar de tomarse como los S en función de las energías instantáneas de los modos.

Consideremos un par de sistemas FPU con el mismo tamaño N y donde las coordenadas q, p de estos sistemas mantienen la misma proporcionalidad para un par de soluciones particulares. Hemos visto que dichos sistemas son cuantitativamente idénticos salvo un reescalamiento en las energías si satisfacen la igualdad (4.3) para el caso en que son un par de cadenas α -FPU o la igualdad (4.4) si se trata de cadenas β -FPU. Esta propiedad supone que en el caso ampliamente estudiado de un estado inicial donde toda la energía se encuentra en el modo fundamental, los únicos parámetros necesarios para caracterizar a cada una de las cadenas α -FPU o β -FPU sean el tamaño del sistema N y la energía específica $\epsilon = E/N$. Este hecho se manifiesta, por ejemplo, en que las leyes cualitativas que se presentaron en el primer capítulo para la cadena α -FPU con un estado inicial dado por el modo fundamental, dependan a lo sumo de 2 parámetros, excluyéndose el parámetro de la perturbación α .

Se ha comprobado de manera experimental que la pequeña recopilación de ecuaciones cualitativas que damos en el primer capítulo se cumplen, excluyendo a las ecuaciones más viejas (1.6) y (1.7) que estiman el periodo de la recurrencia FPU. En su lugar, hemos observado que se cumple la siguiente relación para los periodos de la recurrencia FPU en la cadena α -FPU:

$$T_{FPU}/T_1 = C_{FPU}N^{5/4},$$

con C_{FPU} una constante positiva. Esta ecuación ha resultado ser válida tanto para N grandes como para los valores de N pequeños que se han medido.

También se ha formulado otra relación cualitativa para el caso de la superrecurrencia en la cadena α -FPU, que es la siguiente:

$$T_{SFPU}/T_1 = C_{SFPU}N^{7/4},$$

donde C_{SFPU} es una constante positiva. Se observa que la dependencia con N es diferente del caso de la recurrencia FPU. Además, se vio que los tiempos de superrecurrencia para N bajos no siguen esta ley.

Para concluir, en las medidas del tiempo de formación del estado metaestable, hemos advertido que se cumple una relación más sencilla que la que propone la ecuación (1.9), y es la siguiente:

$$t_{meta} = C_{meta} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}},$$

donde C_{meta} es una constante positiva. Esta ecuación resulta en un ajuste más preciso que la ecuación (1.9) para los datos que se han medido.

Bibliografía

- [BaPo, 2005] D. Bambusi, A. Ponno, "Resonance, Metastability and Blow up in FPU". Lect. Notes Phys. 728, pp.191-205, 2005.
- [BCGG, 2008] G. Benettin, A. Carati, L. Galgani, A. Giorgilli, "The Fermi-Pasta-Ulam Problem and the Metastability Perspective". Lect. Notes Phys. 728, pp.151-189, 2008.
- [BGG, 2004] L. Berchialla, L. Galgani, A. Giorgilli, "Localization of Energy in FPU Chains". Discrete and Continuous Dynamical Systems, Vol. 11, Issue 4, pp. 855-866, 2004.
- [Crivelli, 2008] F. Crivelli, "The Störmer-Verlet method". Notes from the Numerical Analysis Seminar, May 8, 2008.
- [DPR, 2005] T. Dauxois, M. Peyrard, S. Ruffo, "The Fermi-Pasta-Ulam 'numerical experiment': history and pedagogical perspectives". Ins. of Phys. Publishing, Eur. J. Phys., 26, S3-S11, Julio 2005.
- [Elliot, 1953] Joseph F. Elliott, "The Characteristic Roots of Certain Real Symmetric Matrices". Master's Thesis, University of Tennessee, 1953.
- [FPU, 1955] E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam, "Studies of Nonlinear Problems I". Los Alamos Report LA-1940, Mayo 1955, publicado con posterioridad como:
 E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam, "Studies of Nonlinear Problems I". Collected Papers of Enrico Fermi, University of Chicago Press, 1965.
- [Hall, 2013] B. C. Hall, "Quantum Theory for Mathematicians". Graduate Texts in Mathematics 267, Springer, 2013.
- [Huffman, 1952] D. A. Huffman, "A Method for the Construction of Minimum-Redundancy Codes". Proceedings of the IRE, pp. 1098-1101, Septiembre 1952.
- [LaLi, 1978] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, "Mecánica". Curso de Física Teórica, Vol 1, Editorial Reverté, Segunda Edición.
- [Lara, 2001] Teodoro Lara, "Matrices Circulantes". Divulgaciones Matemáticas, Vol.9, No.1, pp.85-102.
- [LoPa, 2006] P. Lorenzoni, S. Peleari, "Metastability and dispersive shock waves in Fermi-Pasta-Ulam system". Physica D: Nonlinear Phenomena, Vol. 221, Issue 2, pp. 110-117, 2006.

- [LvOn, 2018] Y. V. Lvov, M. Onorato, "Double scaling in the relaxation time in the β FPU model". Phys. Rev. Lett. 120, Abril 2008.
- [OVPL, 2014] M. Onorato, L. Vozella, D. Proment, Y. V. Lvov, "Route to thermalization in the α-Fermi-Pasta-Ulam system". PNAS, vol.112, num.14, pp.4208-4213, Abril 2015.
- [PoBa, 2005] A. Ponno, D. Bambusi, "Korteweg-de Vries equation and energy sharing in Fermi-Pasta-Ulam". Chaos, num. 15, 015107, 2005.
- [Ruth, 1983] Ronald D. Ruth, "A canonical Integration Technique". IEEE Transactions on Nuclear Science, Vol. NS-30, No. 4, Agosto 1983.
- [Sanz, 2007] Jesús M. Sanz, "Integración Geométrica". Real Acad. Cien. Ex. Fis. Nat., 2007.
- [Shannon, 1948] C. E. Shannon, "A Mathematical Theory of Communication". The Bell System Technical Journal, Vol. XXVII, No. 3, pp. 379-423, Julio 1948.
- [Solana, 2018] J. R. Solana, "Apuntes de Física Estadística". Notas de clase, Universidad de Cantabria, Facultad de Ciencias, 2018.
- [TuMe, 1972] J. L. Tuck, M. T. Menzel, "The Superperiod of the Nonlinear Weighted String (FPU) Problem". 1972.
- [Weissert, 1997] Thomas P. Weissert, "The Genesis of Simulation in Dynamics". Springer, 1997.