

Tesis de Posgrado

Dinámica canónica de osciladores a temperatura constante

Figliola, María Alejandra

1990

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Figliola, María Alejandra. (1990). Dinámica canónica de osciladores a temperatura constante. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2305_Figliola.pdf

Cita tipo Chicago:

Figliola, María Alejandra. "Dinámica canónica de osciladores a temperatura constante". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1990.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2305_Figliola.pdf

Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Dinámica Canónica de Osciladores a Temperatura Constante

Tesis para optar al Título de Doctor en Ciencias Físicas

María Alejandra Figliola

Marzo de 1990

2305
Ej 2

Director: Jorge Hernando

Lugar de Trabajo: CAECEM-CONICET

INDICE

Introducción	1
Capítulo 1	3
<i>Conceptos generales de la dinámica no lineal</i>	3
1. <i>Noción de flujo</i>	3
2. <i>Sistemas Disipativos y Sistemas Conservativos. Atractores</i>	4
3. <i>Secciones de Poincaré</i>	9
4 <i>Espectro de Potencias</i>	11
5. <i>Dimensiones Características</i>	13
5.1 <i>Problemas de caracterización</i>	13
5.2. <i>Dimensiones Fractales</i>	
5.3. <i>Caracterización geométrica de un atractor</i>	14
6. <i>Los coeficientes de Lyapunov</i>	17
Capítulo 2	20
<i>Un método de dinámica molecular para simulaciones en el conjunto canónico</i>	20
1. <i>Antecedentes del problema</i>	20
2. <i>Ecuaciones de movimiento</i>	23
3. <i>Algunos promedios en el ensemble canónico</i>	26
4. <i>Como interpretar la variable s</i>	28
5. <i>La dinámica Hamiltoniana</i>	29
6. <i>Análisis cualitativo del sistema de Nosé</i>	33
7. <i>Sistemas disipativos</i>	34
Capítulo 3	38
<i>Aplicación del sistema de Nosé a tres casos sin disipación</i>	38
1. <i>El oscilador armónico</i>	38
1.2 <i>Cálculo de los exponentes de Lyapunov</i>	46
2. <i>El modelo de Duffing</i>	49
<i>Espectros de Potencia</i>	54
<i>Coefficientes de Lyapunov</i>	59
3. <i>El oscilador de Duffing impulsado con una fuerza estocástica.</i>	65
3.1. <i>Sistema de Duffing impulsado con una fuerza aleatoria</i>	65
3.2 <i>Sistema de Duffing-Nosé impulsado con una fuerza externa.</i>	67
4. <i>Vidas medias de la partícula dentro del pozo</i>	68

<i>5. La Red de Toda</i>	74
Capítulo 4	80
<i>Sistemas disipativos</i>	80
<i>1. El método de imágenes</i>	80
<i>2. El sistema extendido</i>	83
<i>3. Ampliación del sistema de Nosé</i>	85
Conclusiones	87
Referencias	89
Agradecimientos	91

Introducción

La existencia de ecuaciones no lineales determinísticas que tienen comportamiento caótico o impredecible ha impactado fuertemente en el estudio de los sistemas dinámicos, poniendo en discusión la importancia de muchos resultados tradicionales. Este comportamiento sólo puede provenir de sistemas no lineales.

Métodos tales como teorías perturbativas o método adiabático (LIEBERMAN, 1983) han demostrado fracasar en la descripción de la destrucción de órbitas del espacio de fases, que muestra el cálculo directo (por medios numéricos) de las ecuaciones no lineales.

Por otra parte la existencia de situaciones físicas representadas por un Hamiltoniano integrable pertenece más bien a los cursos de mecánica que a los problemas que a diario nos enfrentamos. Si se tiene en cuenta que el paso a la estocasticidad se da sólo en los Hamiltonianos no integrables, puede medirse la relevancia de este aspecto. Además, estas situaciones son muchísimo más abundantes en la naturaleza. Se ha probado que los Hamiltonianos no integrables forman un conjunto denso, mientras que los integrables no. (SIEGEL, 1954).

Otra notable característica consiste en que sistemas de muy baja dimensionalidad pueden producir situaciones muy complejas. En este aspecto, el primer gran ejemplo lo dió Lorentz, a través de un sistema de tres grados de libertad (LORENTZ, 1963)

La teoría de sistemas dinámicos se usa para describir fenómenos no sólo físicos, sino también biológicos, químicos, económicos, ecológicos, etc, mostrando que en situaciones caóticas existe universalidad en el comportamiento del sistema que prevalece a pesar del origen del mismo. La alta sensibilidad a las condiciones iniciales, es la característica más sobresaliente de los sistemas caóticos, lo que introduce una seria discusión acerca de la validez de modelos linealizados cuando se está trabajando experimentalmente.

La teoría de sistemas no lineales se ha utilizado para el estudio de un sistema Hamiltoniano, en un espacio de fases ampliado que estudia al sistema junto con el exterior, representado por un reservorio a temperatura constante.

Este sistema ha sido propuesto por Suichi Nosé (NOSE, 1984), y constituye una brillante manera de describir el efecto del exterior sobre un sistema, con ecuaciones puramente dinámicas, determinísticas y reversibles temporalmente.

El sistema extendido de Nosé introduce un grado de libertad adicional s , el cual actúa como un sistema externo para el sistema físico de N partículas.

Eligiendo una adecuada función potencial para la variable s , la función de partición del sistema extendido (partícula más variable s) es tal que los valores medios de las variables coincide con la del ensemble canónico.

Al aplicar dicha teoría a sistemas tan simples como un oscilador armónico se observan situaciones cuasiperiódicas y caóticas, lo que habla de la importancia de tratar sistemas no aislados.

El desarrollo de esta tesis es el siguiente:

En el capítulo 1 se resumirán algunos conceptos de la dinámica no lineal que se aplican en el desarrollo.

El capítulo 2 discute los problemas de dinámica molecular y discute detalladamente el formalismo de Nosé.

En el capítulo 3 se aplican las teorías desarrolladas en los capítulos anteriores e tres casos concretos: el oscilador armónico, el sistema de Duffing y la red de Toda.

El último capítulo se estudia la posibilidad de aplicar el formalismo de Nosé a sistemas disipativos.

Finalmente, se discutirán los resultados y se darán las conclusiones.

Capítulo 1

Conceptos generales de la dinámica no lineal

En este capítulo se verán los conceptos fundamentales y las definiciones más usadas en la dinámica no lineal. Los mismos, o bien son resultados usados en el desarrollo de la tesis, o son de suma importancia.

En general se evitarán las demostraciones matemáticas, enunciando simplemente los teoremas y su aplicación.

1. *Noción de flujo*

Muchos fenómenos físicos, biológicos, sociales, económicos, químicos etc, pueden pensarse como sistemas dinámicos. Su descripción es, entonces, mediante un conjunto de n ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, del tipo:

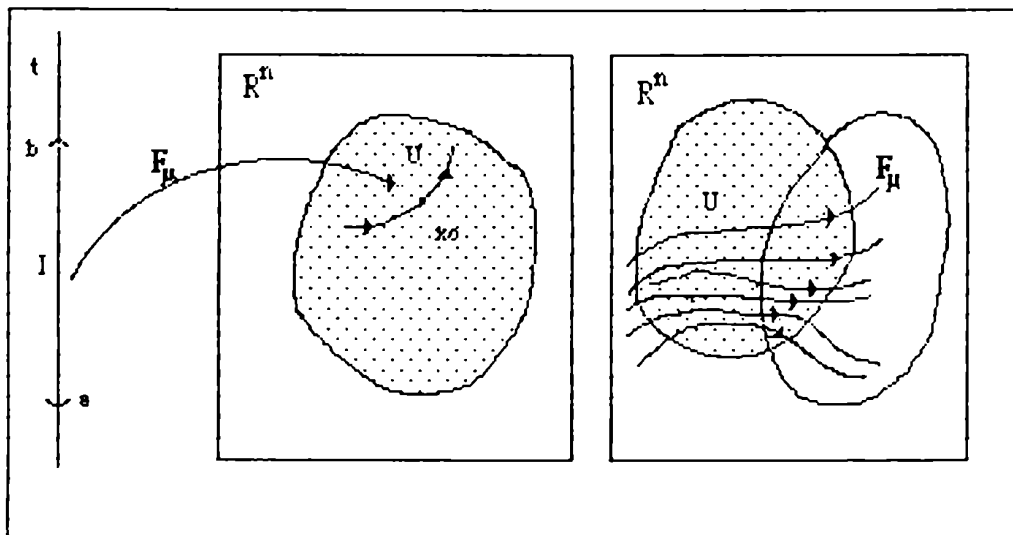
$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{F}_\mu(\mathbf{x}(t), t) \quad (1.1.1)$$

siendo: $\mathbf{x}(t) = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, y la función vectorial $\mathbf{F}_\mu(\mathbf{x}(t), t)$ también $\in \mathbb{R}^n$, una función que depende del vector $\mathbf{x}(t)$, del tiempo t y de los parámetros $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k)$.

Un sistema de ecuaciones como el (1.1.1) se llama **flujo** en \mathbb{R}^n .

Si $\mathbf{F}_\mu(\mathbf{x}(t), t)$ no depende del tiempo de manera explícita, se dice que el flujo es autónomo. En el caso contrario (no autónomo) siempre es posible llevarlo al caso autónomo elevando en uno el número de grados de libertad

tomando el tiempo como la coordenada $n+1$ del vector $\mathbf{x}(t)$ y agregando la ecuación diferencial $\dot{x}_{n+1} = 1$ (GONZALEZ, 1987)



Flujo en \mathbb{R}^n

El campo vectorial $\mathbf{F}_\mu(\mathbf{x}(t), t)$ es, en general, no lineal y el vector $\mathbf{x}(t)$ puede referirse a algún proceso discreto o bien resultar de la discretización del flujo, como se verá más adelante. Para que el sistema (1.1.1) quede absolutamente caracterizado, hacen falta dar los n valores del vector $\mathbf{x}(t)$ para el instante inicial, es decir $\mathbf{x}(t_0)$.

2. Sistemas Disipativos y Sistemas Conservativos. Atractores

El teorema de Liouville divide a la dinámica en dos grandes ramas: sistemas disipativos y sistemas conservativos. En estos últimos cada volumen del espacio de fases se conserva bajo la acción del flujo. En los disipativos, esto deja de ser verdad y un cambio relativo del volumen V está dado por:

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = \text{div } \mathbf{F}_\mu = \sum_{i=1}^n \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} \quad (1.2.1)$$

siendo la divergencia de \mathbf{F} una cantidad negativa (para los sistemas conservativos la divergencia es cero), lo que implica la tendencia a contraer los volúmenes del espacio de fases. Para $t \rightarrow \infty$ el volumen se contraerá a cero.

Cada condición inicial será finalmente atraída hacia un conjunto de volumen cero llamado **atractor**.

La ventaja de estudiar los fenómenos sobre el atractor, consiste en que en él ya desaparecieron los transitorios. Con la idea de atractor viene asociada el concepto de cuenca de atracción, que es el conjunto de condiciones iniciales que dan lugar a una trayectoria atraída por el atractor. Tiene volumen distinto de cero (puede incluso ser infinito).

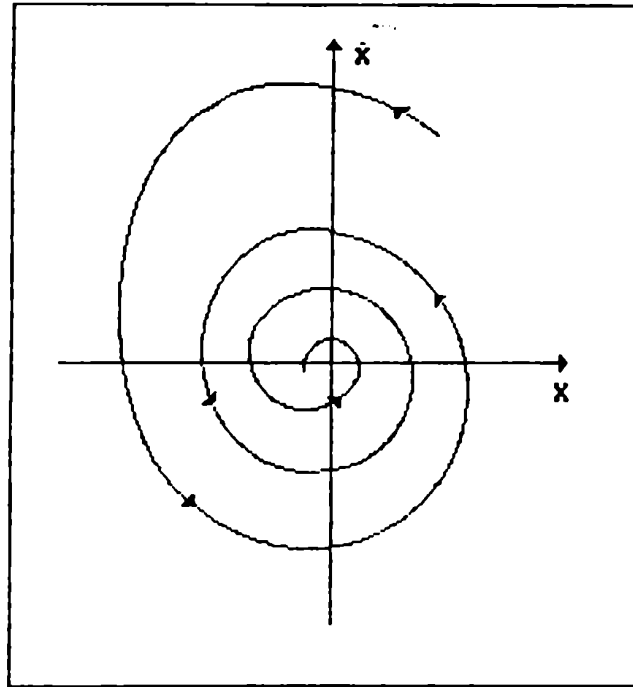
Los atractores se clasifican en tres grandes categorías:

Puntos fijos:

a) Estable: Es un punto que atrae hacia sí todas las trayectorias provenientes de la cuenca de atracción.

b) Inestables: En determinadas circunstancias (cambio del parámetro μ) un punto fijo estable puede perder su estabilidad, repeliendo todas las trayectorias cercanas. Pero este cambio es local: afecta a las trayectorias inmediatas a él y no a las más lejanas que continúan siendo atraídas hacia el punto fijo.

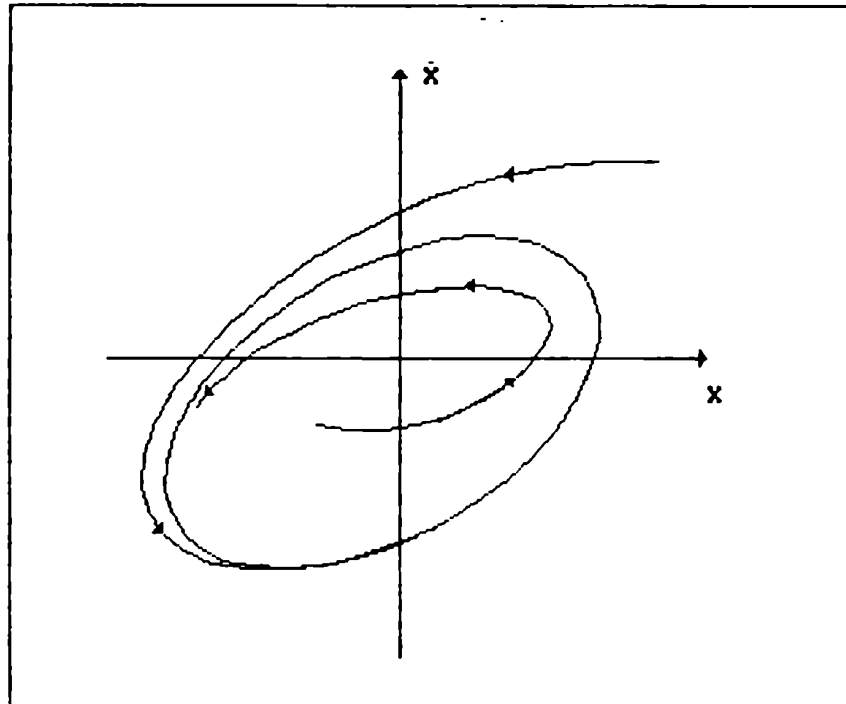
Estos dos fenómenos juntos provocan la formación de una curva cerrada que se conoce como ciclo límite.



Punto fijo estable

Ciclos límites:

El sistema permanece indefinidamente en ella, y corresponde a un movimiento periódico.



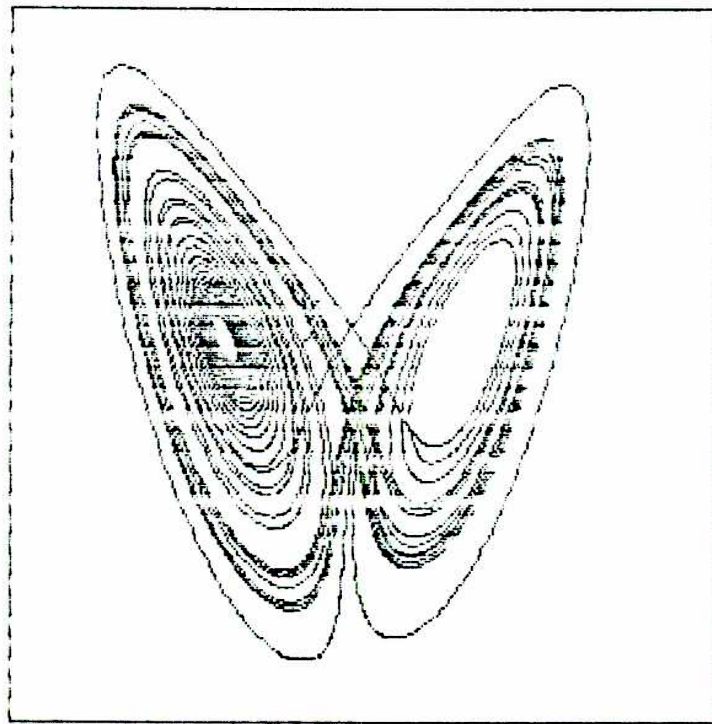
Ciclo límite

Atractor extraño :

Son estructuras muchísimo más complejas que las descritas anteriormente. Sus características más sobresalientes son:

1) Si se considera una sucesión de puntos sobre el atractor, se encuentra que es aleatoria. Es más, al calcular la función de autocorrelación sobre ella se anula rápidamente (POMMEAU Y VIDAL. 1983). Su espectro es del tipo llamado "banda ancha", es decir que no existe ninguna armónica (periodicidad) definida, y se lo suele confundir con un espectro de ruido blanco. (OPPENHEIMER. 1976).

2) Tiene extrema sensibilidad a las condiciones iniciales: puntos muy cercanos entre sí en la cuenca de atracción se separan muchísimo en las trayectorias del atractor.



Atractor extraño correspondiente al mapa de Lorentz

3) Está confinado en un espacio finito dentro del espacio de fases. No es posible separarlo en subconjuntos más simples. La razón es que cualquier trayectoria, si se la deja evolucionar lo suficiente, recorre todos los puntos del atractor. En este sentido se dice que es ergódico.

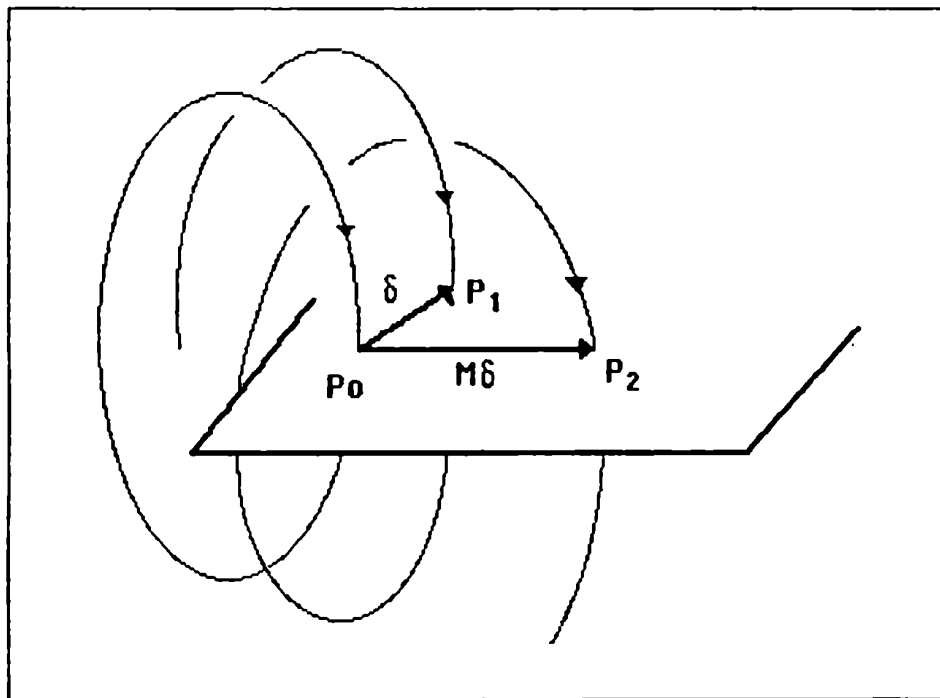
4) Son propios de los sistemas disipativos. Aparecen cuando hay una contracción de volumen que no es homogénea en todas las direcciones. (es decir que en alguna dirección se estira en vez de contraerse). Como permanece en una región finita de espacio de fases debe plegarse, lo que genera una estructura complejísima.

5) Conviene aclarar que no todos los atractores extraños son caóticos. (DING, GREBOGI, 1989). Los conceptos de extrañeza y caoticidad son independientes, aunque en la gran mayoría de los casos los atractores caóticos son tam-

bién extraños. El caos está asociado a la extrema sensibilidad a las condiciones iniciales, mientras que la extrañeza tiene que ver con la dimensión fractal, que es no entera. En un caso se maneja una idea dinámica mientras que en el otro una idea geométrica.

3. Secciones de Poincaré

La superficie o sección de Poincaré es un plano que es atravesado por el flujo F_μ , tal como se lo muestra en la Figura.



Sección de Poincaré

Se toma la sucesión de puntos del flujo que intersectan con el plano y que tienen una dirección definida : P_0, P_1, \dots, P_k . Esta operación reduce inmediatamente el estudio del problema en una dimensión. La transformación T

que conduce de un punto a otro punto es una aplicación continua T en el plano S , en sí misma:

$$P_{k+1} = T(P_k) = T^2(P_{k-1}) = \dots \quad (1.2.1)$$

La sección de Poincaré, lleva de una aplicación continua como la dada en (1.1.1) a una discreta.

Lo más importante es que esta aplicación conserva las propiedades topológicas del flujo; por lo que se pueden extraer interesantes conclusiones de ella.

Resumiendo:

1) Permite pasar de un flujo en \mathbf{R}^3 a una aplicación discreta en \mathbf{R}^2 reduciendo en uno el número de grados de libertad.

2) La discretización a la que se hace referencia permite trabajar con ecuaciones algebraicas en vez de ecuaciones diferenciales.

3) Se manejan muchos menos puntos, lo que se traduce en mayor velocidad y mayor comodidad de cálculo.

4) Una visión a ojo desnudo en un plano es mucho más fácil y directa a las interpretaciones que una proyección en el plano de un volumen de \mathbf{R} .

4 Espectro de Potencias

Dada una señal a tiempo discreto $x(n)$, con n variando entre 1 y N , su espectro de potencias es la transformada Fourier de la función de autocorrelación, cuyo estimador más usado es:

$$c(m) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-|m|-1} x(n) x(n+m) \quad (1.4.1)$$

En el caso de una serie temporal finita, un estimador del espectro de potencias, se define como:

$$I_N(\omega) = \sum_{m=-(N-1)}^{N-1} c(m) e^{-i\omega m} \quad (1.4.2)$$

La transformada de Fourier de la señal es:

$$X(e^{i\omega}) = \sum_{n=0}^{N-1} x(n) e^{-i\omega n} \quad (1.4.3)$$

y, es fácil verificar que:

$$I_N(\omega) = \frac{1}{N} |X(e^{i\omega})|^2 \quad (1.4.4)$$

Existen otro tipo de estimaciones espectrales, como el espectro de

Máxima Entropía, o bien correcciones al espectro, que usan funciones ventana (que no es otra cosa que una ponderación de los datos) para mejorar el estimador.

El espectro de potencias sirve para ver si el sistema es periódico, cuasi-periódico, o no tiene periodicidad definida. Si es periódico, mostrará un pico importante para la frecuencia ω , y para sus armónicas, 2ω , 3ω ... etc. En el caso cuasiperiódico, aparecerán picos para un cierto conjunto de frecuencias $\omega_1 \dots \omega_k$, para sus armónicas y para todas las combinaciones lineales de éstas con coeficientes enteros.

El caso caótico, presenta un espectro sin periodicidades definidas, de banda ancha, que suele confundirse con el del ruido blanco. Sin embargo, este espectro no proviene de un sistema de dimensionalidad infinita, sino que tiene un número acotado de grados de libertad, incluso en algunos casos, muy pocos.

En el escenario de Feigenbaum (FEIGENBAUM, 1979), la ruta al caos se da por duplicación de período, siendo para este caso de mucho interés, el cálculo de los correspondientes espectros, donde aparecerán las bifurcaciones representadas por la aparición de un nuevo pico de frecuencia:

$$f_k = \frac{f_0}{2^k} \quad (1.4.5)$$

Otras rutas al caos, como la de Ruelle-Newhouse-Takens (NEWHOUSE et al. 1978), pueden también ser visualizadas, porque el sistema se desestabiliza, con la aparición de tres frecuencias básicas independientes, que corresponden a tres bifurcaciones de Hopf. En algunos casos, la aparición de la tercera frecuencia viene acompañada con el espectro de banda ancha, lo que hace perder su identidad.

El espectro de potencias es una herramienta útil, pero insuficiente para caracterizar la dinámica no lineal. En lo que sigue veremos otras posibilidades para lograrlo.

5. Dimensiones Características

5.1 Problemas de caracterización

En la anterior sección, se vió que una herramienta muy usada para caracterizar a los regímenes dinámicos es a través del análisis del espectro de potencias, con la transformada de Fourier. Sin embargo, en un régimen caótico, esta técnica no puede distinguir entre el "caos determinístico" y el ruido aleatorio. Por otra parte, el estudio de las secciones de Poincaré sólo dan resultados cualitativos, además su utilidad se reduce a espacios de fases tri-dimensionales.

Es por ello que se han desarrollado técnicas alternativas para el estudio de la dinámica caótica. Estas consisten en el cálculo de las dimensiones características del sistema cuya descripción se hará a continuación.

5.2. Dimensiones Fractales:

Dado un conjunto de puntos en un espacio de p dimensiones, la idea consiste en cubrir todo el conjunto con cubos o hipercubos de lado ϵ . El mínimo número necesario de cubos para cubrir todo el conjunto es una función del lado ϵ , que se indica como $N(\epsilon)$.

Hausdorff-Besicovitch definen la dimensión D como:

$$D = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln N(\epsilon)}{\ln(1/\epsilon)} \quad (1.5.1)$$

De lo anterior surge que el número mínimo de cubos $N(\epsilon)$ necesarios para cubrir el conjunto variará como ϵ^{-D} . Es claro que en el caso de un conjunto de un solo punto, $N(\epsilon) = 1$, y por lo tanto $D=0$. Luego, la dimensión de Hausdorff del punto es cero coincidentemente con la dimensión euclidea del punto.

Para el caso de un segmento de recta de longitud 1:

$$N(\epsilon) = L\epsilon^{-1} \quad (1.5.2)$$

luego $D = 1$, también coincide con la dimensión euclidea de la recta.

Es sencillo de ver que para un área $D = 2$. La dimensión D de Hausdorff se caracteriza por ajustarse a la euclidea.

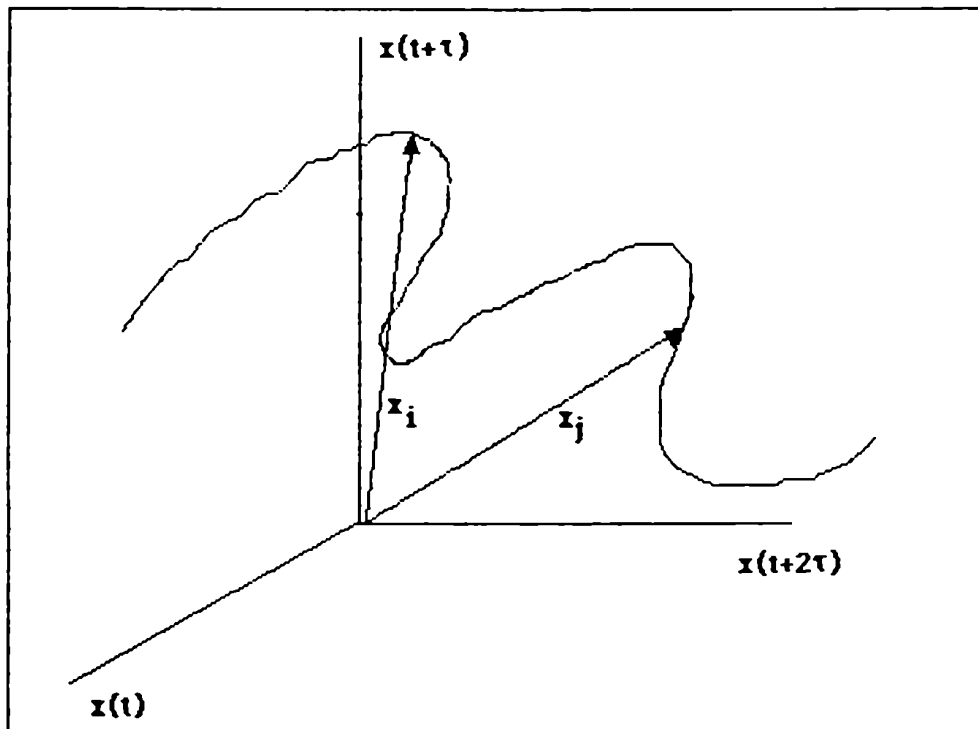
5.3. Caracterización geométrica de un atractor

A partir del conocimiento de una variable temporal $x(t)$, se puede reconstruir una trayectoria significativa en un espacio de p -dimensiones. La técnica se conoce como *reconstrucción en el espacio de fases del atractor*, y consiste en generar las coordenadas de la siguiente manera:

$$x(t), x(t+\tau), x(t+2\tau), \dots, x(t+(p-1)\tau) \quad (1.5.1)$$

donde τ es un retardo temporal discreto elegido. Sobre la elección del tiempo τ se puede hacer tomando el tiempo correspondiente al primer cero de la función de autocorrelación de la variable $x(t)$, o bien reconstruyendo gráfica-

mente el atractor y haciendo la elección 'a ojo', de manera que la reconstrucción coincida con el retrato de fases.



Reconstrucción del atractor

Otros autores proponen el cálculo de una función de entropía mutua, y el tiempo de retardo correspondería al tiempo en el que se anula dicha función. (ROMANELLI, 1989)

Cuando el sistema se encuentra en régimen caótico, las correlaciones entre dos trayectorias próximas, caen a cero rápidamente (esto puede pensarse como que el sistema pierde memoria muy rápidamente); pero existe una función espacial que conecta a todos los puntos situados sobre el atractor, y es la **correlación espacial**, cuya forma es:

$$C(r) = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m^2} (\text{n}^\circ \text{ de pares } i, j \text{ cuya distancia es menor que } r)$$

que escrito formalmente:

$$C(r) = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m^2} \sum_{i,j=1}^m \theta(r - |\bar{x}_i - \bar{x}_j|) \quad (1.5.2)$$

donde θ es la función de Heviside. El número de pares i, j cuya distancia es menor que r estarán entonces contenidos en un hipercubo $N(r)$ por lo que $C(r)$ y $N(r)$ son proporcionales entre sí. Luego

$$C(r) \approx r^v \quad (1.5.4)$$

Esta ley contempla la aparición de un efecto de saturación de $N(r)$ frente al crecimiento de r , en el momento en que el radio cubra todos los puntos sobre el atractor.

A partir de los valores discretos $x(t_j)$ obtenidos experimentalmente, se puede reconstruir la trayectoria en un espacio p -dimensional, para los valores de $p = 2, 3, 4, \dots$ etc. La dimensión p es la dimensión de embedding, que es la mínima dimensión "euclídeana" (y por lo tanto entera) donde puede encastrarse el atractor. Por ejemplo, para el conjunto de Cantor la dimensión de embedding o de encastre es 1.

Para cada valor de p se calcula $C(r)$ y con ella se puede determinar la pendiente de la curva $\log C(r)$ vs $\log(r)$ que no es otra cosa que el exponente v .

El cálculo de la pendiente se hace por cuadrados mínimos. Una vez obtenidas las pendientes, se grafican en función de la dimensión de embedding.

La aparición de saturación de la curva es lo que decide si la señal es ruido aleatorio o no. Con el ruido, el valor de la señal es considerada como la suma de infinitos modos de oscilación independientes. Por lo tanto la dimensión de embedding, crece indefinidamente porque se necesita un espacio de fases infinito para contener a los modos de oscilación. En cambio si satura puede ser un fenómeno periódico o bien "caos determinístico".

El valor de la saturación es precisamente el valor del coeficiente de correlación. Si ν es entero, el fenómeno es típicamente periódico. Si no, es caos determinístico. El entero mayor más próximo ν , es el número de grados de libertad efectivos del sistema. Si el atractor es homogéneo (uniforme), cada caja que se tome tendrá la misma cantidad de puntos por lo que las dimensiones de correlación y fractal coincidirán. Pero los atractores caóticos son típicamente inhomogéneos, por lo que $\nu < D$.

6. Los coeficientes de Lyapunov

La característica más importante de la situación caótica es la alta sensibilidad a las condiciones iniciales. Ocurre que dos situaciones iniciales muy próximas entre sí, dan lugar a trayectorias que se alejan rápidamente (divergentes). Una medida de la velocidad de divergencia entre trayectorias vecinas entre sí, son los coeficientes o exponentes de Lyapunov.

Para el caso unidimensional se define como

$$\lambda(x_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{N} \log \left| \frac{f^N(x_0 + \epsilon) - f^N(x_0)}{\epsilon} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left| \frac{df^N(x_0)}{dx_0} \right|$$

donde f^N significa el mapa N veces iterado; o sea

$$f^N = f \circ f \circ \dots \circ f$$

nótese que de la definición surge que:

$$\left| f^N(x_0 + \epsilon) - f^N(x_0) \right| \cong \epsilon e^{N\lambda(x_0)}$$

Pero d^N es la distancia entre los puntos obtenidos al iterar N veces el mapa partiendo de x_0 y $x_0 + \epsilon$. Por su parte ϵ es la distancia entre los puntos de partida x_0 y $x_0 + \epsilon$. Es decir que $\epsilon e^{\lambda(x_0)}$ es el factor promedio por el cual se estira la distancia entre dos puntos muy próximos luego de cada iteración. Es fácil de ver además que mide también la pérdida de información: por ejemplo si se dispone de una cierta información acerca de un sistema al tiempo inicial, ésta irá reduciéndose a medida que el sistema evoluciona con una velocidad que es igual al coeficiente de Lyapunov positivo. Esto es muy importante cuando se trata con problemas de predicción.

Un exponente de Lyapunov positivo significa que el mapa en cada iteración produce en promedio un alejamiento de puntos que inicialmente eran muy próximos.

La generalización a d dimensiones es sencilla, y aparecerán en principio d coeficientes de Lyapunov, algunos negativos, algunos ceros y pueden aparecer positivos. Se está en presencia de caos si aparece al menos un coeficiente positivo.

Los coeficientes negativos indican las direcciones del atractor en los cuales existe una contracción. Cuando el coeficiente es cero, el sistema no cambia en esa dirección (típicamente aparecen en situaciones cíclicas). Los coeficientes positivos indican las direcciones de dilatación.

En el caso de un sistema disipativo, cuyo volumen en el espacio de las fases es cero, la suma de los coeficientes de Lyapunov debe ser un número negativo. Para los sistemas conservativos la suma debe ser igual a cero, ya que la contracción en el espacio de fases debe ser igual a la dilatación, para conservar el volumen.

Capítulo 2

Un método de dinámica molecular para simulaciones en el conjunto canónico

1. Antecedentes del problema

En la última década se han hecho intensos esfuerzos en el uso de computadoras para simular sistemas de varios cuerpos. La mayor dificultad, reside en tener que usar variables de control sobre las variables termodinámicas independientes, como por ejemplo la temperatura o la presión. En general, se puede decir que existen dos técnicas tradicionales para el tratamiento de estos problemas: el método de dinámica molecular y el de Monte Carlo.

La técnica de dinámica molecular para el estudio de fluidos y sólidos, ha sido muy importante y muy usada. Resuelve numéricamente las ecuaciones de Newton de las partículas dentro de una celda de volumen V fijo. La energía E se conserva y entonces la solución del conjunto se genera por simulación con un ensemble microcanónico (E,V,N)

Con dinámica molecular, no sólo se obtienen cantidades estáticas del conjunto sino también cantidades dinámicas, lo que lo aventaja sobre el método de Monte Carlo. Sin embargo, en la mayoría de los experimentos, no es común tener las condiciones de la simulación hecha con este método (presión y temperatura constantes)

Andersen (ANDERSEN. 1980) introduce una modificación en la que permite una fluctuación del volumen (en este aspecto se parece al Monte Carlo). El promedio del volumen queda determinado por el balance entre la presión externa y la interna. Aproximadamente se conserva la entalpía del sistema, siendo un conjunto de entalpía y presión constante (H,P,N)

Otras modificaciones sobre el método de Andersen permiten cambiar la forma de la celda (PARINELLO, 1980,1981). Numerosos trabajos han demostrado las ventajas y limitaciones de estos métodos.

Para lograr condiciones de simulación de dinámica molecular a temperatura constante, un método muy difundido consiste en escalar las velocidades en cada paso de tiempo. (WOODCOCK L.,1971; ABRAHAM, F. 1982).

Por otra parte, (HOOVER, 1982) adiciona un término dependiente de las velocidades a las fuerzas que actúan sobre para mantener la energía cinética total constante. Las ecuaciones son:

$$\begin{aligned} \frac{dq_i}{dt} &= \frac{p_i}{m_i} \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial \phi}{\partial q_i} - \beta p_i \end{aligned} \quad (2.1.1)$$

El parámetro β se determina a partir del requerimiento de energía cinética total constante:

$$\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} = \frac{fk_B T}{2} \quad (2.1.2)$$

lo que implica:

$$\sum_{i=1}^N p_i \frac{dp_i}{dt} / m_i = 0 \quad (2.1.3)$$

Entonces,

$$\beta = - \frac{\sum_i^N \frac{d\phi}{dq_i} p_i / m_i}{\sum_i^N p_i^2 / m_i} \quad (2.1.4)$$

Este método puede producir distribución canónica en la coordenada espacial si se elige $f=3N$, siendo N el número de partículas.

Recientemente han aparecido en el escenario de la física estadística los trabajos de Süichi Nosé, que presentan una novedosa y simple manera de tratar de resolver estos viejos problemas. Se basa en la introducción de un nuevo grado de libertad s , el cual actúa como un sistema externo al sistema de N partículas. Además, la adecuada elección de un potencial específico para la variable s , que es igual a $(f+1)k_B T \ln(s)$, asegura que el promedio de las cantidades estáticas de este método es igual a los promedios de las del conjunto canónico (NOSE. 1983). Por otra parte se demuestra que las ecuaciones anteriores surgen del sistema extendido propuesto por Nosé, imponiendo un determinado vínculo, lo que hace que sea un método más amplio y más poderoso.

Las ecuaciones de Nosé hacen posible simular y de analizar teóricamente, sistemas conectados a reservorios térmicos o mecánicos sin necesidad de introducir fuerzas estocásticas o irreversibles. De hecho, aún lejos del equilibrio, las nuevas ecuaciones son reversibles temporalmente y son determinísticas.

El método es puramente dinámico. En el espacio de fases extendido de las partículas más la variable s , el Hamiltoniano se conserva. Ha sido aplicado al estudio de difusión, viscosidad y conducción calórica en sólidos y fluidos, (HOOVER. 1983, 1985, 1986) con simulación computacional.

2. Ecuaciones de movimiento

Consideremos un sistema físico consistente en N partículas con coordenadas r_1, r_2, \dots, r_N en un volumen fijo V y con una energía potencial $\phi(r)$.

Se introduce un nuevo grado de libertad s el cual actúa como conexión con el sistema externo (reservorio térmico). La interacción entre el sistema físico y la variable s se expresa como un factor de escala en las velocidades de las partículas.

$$v_i = s \dot{r}_i \quad (2.2.1)$$

donde v_i es la velocidad real de la partícula i

La variable s conecta el sistema físico y el sistema externo, produciendo entre ellos un intercambio de calor. Se asocia la energía potencial de la variable s con:

$$(f+1) kT_{eq} \ln(s) \quad (2.2.2)$$

siendo:

f : número de grados de libertad del sistema físico.

k : constante de Boltzman.

T_{eq} : temperatura del baño externo o reservorio

La elección (2.2.2) asegura que el ensemble canónico promedio es recuperado.

El Lagrangiano del sistema extendido es:

$$L = \sum_i^N \frac{m_i}{2} \dot{s}^2 \dot{r}_i^2 - \phi(\mathbf{r}) + \frac{\alpha}{2} \dot{s}^2 - (f+1) k_B T_{eq} \ln s \quad (2.2.3)$$

El término de energía cinética $\alpha \dot{s}^2/2$ se introduce para construir una ecuación dinámica en s , la cual permite describir el movimiento del baño térmico.

El parámetro α tiene dimensiones de energía/tiempo² y determina la escala temporal de la fluctuación de temperatura (es decir velocidad del baño para mantener el sistema extendido a temperatura constante)

Las ecuaciones de movimiento para r_i y s surgen de la aplicación de las ecuaciones de Lagrange a (2.2.3):

$$\frac{d}{dt} (m_i \dot{s}^2 \dot{r}_i) = - \frac{\partial \phi}{\partial r_i} \quad (2.2.4)$$

$$\ddot{r}_i = - \frac{1}{m_i \dot{s}^2} \frac{\partial \phi}{\partial r_i} - \frac{2\dot{s}}{s} \dot{r}_i \quad (2.2.5)$$

La ecuación para la variable s asociada al baño térmico es:

$$\alpha \ddot{s} = \sum_i m_i \dot{s} \dot{r}_i - (f+1) \frac{k_B T_{eq}}{s} \quad (2.2.6)$$

Si se calcula el valor medio de (2.2.6), se comprueba que:

$$\left\langle \frac{\sum_i m_i \dot{s}^2 \dot{r}_i}{s} \right\rangle = (f+1) \frac{k_B T_{eq}}{s} \quad (2.2.7)$$

porque el valor medio de \dot{s} tiende a cero.

Esta última ecuación, sugiere que el promedio de la energía cinética interna coincide con la temperatura del baño.

Los momentos lineales están dados por:

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = m_i s^2 \dot{r}_i \\ p_s &= \frac{\partial L}{\partial \dot{s}} = \alpha s \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

Es posible también escribir el Hamiltoniano del sistema extendido:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i s^2} + \phi(\mathbf{r}) + \frac{p_s^2}{2\alpha} + (f+1)k_B T_{eq} \ln s \quad (2.2.9)$$

Nosé, prueba también que el método es equivalente a un ensemble canónico.

Se ha calculado la función de partición Z para dicho conjunto y transformando el momento p_i como:

$$p_i' = \frac{p_i}{s} \quad (2.2.10)$$

y el elemento de volumen resulta $dp = s^f dp'$ (f es el número de grados de libertad).

Integrando en cada correspondiente variable dentro del espacio de fases extendido: $dp dp_s dr ds$ (se usa notación abreviada), se obtiene el resultado final:

$$Z = \frac{1}{(f+1)} \left(\frac{2\pi\alpha}{k_B T_{eq}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{E}{k_B T_{eq}}\right) Z_c \quad (2.2.11)$$

donde Z_c es la función de partición del ensemble canónico.

$$Z_c = \frac{1}{N!} \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r} \exp(-H(\mathbf{p}', \mathbf{r})/k_B T_{eq}) \quad (2.2.12)$$

El promedio de una cantidad estática, la cual es función arbitraria de p_i , r_j y s es exactamente la misma en el sistema extendido que en el ensemble canónico.

$$\left\langle A\left(\frac{\mathbf{P}}{S}, \mathbf{r}\right) \right\rangle = \left\langle A(\mathbf{p}', \mathbf{r}) \right\rangle_c \quad (2.2.13)$$

$\langle \dots \rangle_c$ significa promedio sobre el ensamble canónico. Este resultado proviene de asumir que se conserva el Hamiltoniano total H .

3. Algunos promedios en el ensemble canónico

Si se define como temperatura instantánea a:

$$\sum_i \frac{P_i^2}{2m_i s^2} = \frac{f}{2} k_B T_{eq} \quad (2.3.1)$$

el promedio y la fluctuación de T respectivamente son:

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \langle T_c \rangle = T_{eq} \\ \langle (T - T_{eq})^2 \rangle &= \langle (T - T_{eq})_c^2 \rangle = T_{eq}^2 \frac{1}{f} \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

se puede ver que la capacidad calórica C_V se deriva de la fluctuación de la energía total:

$$C_V = \frac{f_k}{2N} + \frac{\langle \Phi^2 \rangle_c - \langle \Phi \rangle_c^2}{N k_B T_{eq}^2} \quad (2.3.3)$$

También se puede calcular el promedio de las cantidades dependientes de s como:

$$\langle B(\frac{P}{S}, r), s^m \rangle = \exp\left[\frac{mE}{(f+1)k_B T_{eq}}\right] \left(\frac{f+1}{f+1+m}\right)^2 \left\langle B(p, r) \exp\left[-\frac{m}{(f+1)k_B T_{eq}} H(p, r)\right] \right\rangle_c \quad (2.3.3)$$

un caso especial es:

$$\langle s^m \rangle = \exp\left[\frac{mE}{(f+1)k_B T_{eq}}\right] \left(\frac{f+1}{f+1+m}\right)^{(f+1)/2} \left\langle \exp\left[-\frac{m}{f+1} \frac{\Phi}{k_B T_{eq}}\right] \right\rangle_c \quad (2.3.4)$$

y

$$\left\langle \frac{P_i^2}{m_i s^3} \right\rangle = \left\langle \frac{P_i^2}{m_i s} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{s} \right\rangle \frac{(f+1)}{f} k_B T_{eq} \quad (2.3.5)$$

4. Como interpretar la variables

Al obtener las cantidades dinámicas, la variable s puede ser interpretada como un factor de escala para el paso temporal Δt in las simulaciones. El paso real de tiempo $\Delta t'$ se obtiene de la relación:

$$\Delta t' = \frac{\Delta t}{s} \quad (2.4.1)$$

La longitud de cada tiempo $\Delta t'$ es desigual.

La ecuación (2.4.1) se deduce de lo siguiente. Si se transforman simultáneamente $s' = s/a$ y $t' = t/a$, por una constante a , las coordenadas y sus derivadas cambian como:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \mathbf{r}, \quad \dot{\mathbf{r}}' = a\dot{\mathbf{r}}, \quad \ddot{\mathbf{r}}' = a^2\ddot{\mathbf{r}}, \dots \\ \mathbf{p}' &= \frac{\mathbf{p}}{a}, \quad t' = \frac{t}{a}, \\ s' &= \frac{s}{a}, \quad \dot{s}' = \dot{s}, \quad \ddot{s}' = a\ddot{s} \end{aligned} \quad (2.4.2)$$

El Hamiltoniano H_1 es invariante excepto por un término constante

$$H'_1 = H_1 - (f+1)k_B T_{eq} \ln a. \quad (2.4.3)$$

solo el radio t/s tiene significado real. En el caso $s = 1$, el Hamiltoniano recobra su forma normal, no escalada. El tiempo corresponde también al tiempo real.

La velocidad puede reexpresarse como:

$$\mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt'} = s \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} \quad (2.4.4)$$

En general, cuando se trate la dinámica Hamiltoniana, se verá que resulta cómodo escalar el tiempo a través de las derivadas temporales expresadas en términos de derivadas de "tiempos escalados", lo que conduce a tomar:

$$\frac{d}{dt}_{\text{nueva}} = s \frac{d}{dt}_{\text{vieja}} \quad (2.4.5)$$

o equivalentemente $dt_{\text{nueva}} = dt_{\text{vieja}}/s$

5. La dinámica Hamiltoniana

El hamiltoniano de Nosé de varios cuerpos es:

$$H_N = \sum_i \frac{P_i^2}{2m_i s^2} + \Phi + \frac{P_s^2}{2\alpha} + N(f+1)k_B T_{eq} \ln s \quad (2.5.1)$$

siendo Φ el potencial del sistema, y es función de las Q_i coordenadas de las partículas. Las ecuaciones de movimiento a partir de las ecuaciones de Hamilton son:

Para cada solución de estas ecuaciones, el Hamiltoniano corresponde a una constante de movimiento. Otras formas de ecuaciones de movimiento pueden ser obtenidas de (2.5.2) a través de la escala temporal. A partir de (2.4.1) las derivadas varían por un factor s , luego:

$$\left. \frac{d}{dt} \right)_{\text{nueva}} = s \left. \frac{d}{dt} \right)_{\text{vieja}} \quad (2.5.3)$$

Lo que puede ser escrito como:

$$dt_n = \frac{dt_w}{s} \quad (2.5.4)$$

Las ecuaciones resultan:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_i &= \frac{P_i}{m_i s} & \dot{P}_i &= s F_i \\ \dot{s} &= \frac{s P_E}{\alpha} & \dot{P}_E &= \sum_i \left[\frac{P_i^2}{m_i s^2} - (f+1) k_B T_{\text{eq}} \right] \end{aligned} \quad (2.5.5)$$

donde $F_i = -\Phi_i$ es la fuerza actuando sobre la partícula i . Es necesario enfatizar que las trayectorias en el espacio (Q, P, s, P_E) de (2.5.2) y de (2.5.5) son idénticas, pero son trazadas a diferentes velocidades. La escala s simplemente actúa como un reloj. Por supuesto, ambos conjuntos de variables tienen la misma constante de movimiento H

Una descripción aún más simple es obtenida transformando a nuevas variables q_i , p_i y ζ de acuerdo con:

$$q_i = Q_i$$

$$p_i = m\dot{q}_i = \frac{P_i}{s}$$

$$\zeta = \frac{d}{dt}(\ln s) = \frac{\dot{P}_s}{\alpha} \quad (2.5.6)$$

Las ecuaciones de movimiento se reducen a tres:

$$\dot{q}_i = \frac{P_i}{m_i}$$

$$\dot{P}_i = F_i - \zeta P_i$$

$$\dot{\zeta} = \frac{1}{\alpha} \sum_i \left(\frac{P_i^2}{m_i} - (f+1)k_B T_{eq} \right) \quad (2.5.7)$$

El coeficiente ζ acopla el baño de N-partículas con el sistema, a temperatura constante. Puede interpretarse como un término de fricción.

El sistema pierde energía a través del coeficiente ζ , pero al mismo tiempo es excitado por el baño térmico que impide que decaiga totalmente. Esto puede interpretarse como un sistema disipativo excitado por una fuerza externa.

La conservación de la energía transforma a la ecuación (2.5.1) en:

$$H = \sum_i \frac{P_i^2}{2m_i} + \Phi + N(f+1)k_B T_{eq} \int_0^t \zeta(t') dt' + \frac{\zeta^2}{2\alpha} \quad (2.5.6)$$

Sin embargo, con este conjunto de ecuaciones se pierde el hecho que las variables sean canónicas conjugadas, por lo que para reconstruirlas es necesario calcular la variable s , que a partir de las ecuaciones anteriores es:

$$s = \exp \left[\frac{(H_N - \sum_i \frac{P_i^2}{2m_i} - \Phi - \alpha \frac{\xi^2}{2})}{N(f+1)k_B T_{eq}} \right] \quad (2.5.7)$$

Por lo tanto, en términos de velocidad de cálculo, no hay mayores variaciones y por otro lado surgen complicaciones de cálculo.

Las ecuaciones dinámicas resultan relativamente complicadas para la mayoría de los sistemas.

Aún en el caso del oscilador armónico, que es un caso estable, conduce a situaciones de altas periodicidades.

Para un gas ideal, de N partículas en el cual todas las fuerzas internas son cero, las ecuaciones resultan muy simples. Si se introduce la variable \mathbf{X}

$$\mathbf{X} = \ln \left[\frac{\sum_i \frac{P_i^2}{m_i}}{N(f+1)k_B T_{eq}} \right] \quad (2.5.8)$$

Las ecuaciones se reducen a un sistema de segundo orden, cuya ecuación diferencial es:

$$\ddot{\mathbf{X}} = \frac{-2N}{\alpha} (f+1) k_B T_{eq} [\exp(\mathbf{X}) - 1] \quad (2.5.9)$$

la energía cinética es:

$$\Phi_{eff} = \frac{-2N(f+1)k_B T_{eq}}{\alpha} (e^{\mathbf{X}} - 1 - \mathbf{X}) \quad (2.5.10)$$

la cual es similar a una partícula oscilando con un potencial de Toda. Para $\alpha \gg i$, resulta que \mathbf{x} oscila con una frecuencia aproximada a $\alpha^{-1/2}$. El momento de cada partícula oscila en módulo pero no en dirección.

6. Análisis cualitativo del sistema de Nosé

El análisis cualitativo se basa en el desarrollo del sistema de ecuaciones linealizando en torno a puntos fijos o de equilibrio. (GONZALEZ, 1986) Sin embargo, es fácil ver que este tipo de ecuaciones no tiene puntos fijos, cualquiera sea el potencial. Al igualar a cero los términos de la derecha de (2.5.2) surge que $P_i=0$ para todo i , pero además:

$$0 = \frac{1}{s} \sum_i \left[\frac{P_i^2}{m_i s^2} - (f+1)k_B T_{eq} \right] \quad (2.6.1)$$

siendo la única posibilidad de cumplir esta ecuación $(f+1)k_B T_{eq} = 0$, lo cual no es válido para este tratamiento.

Si se piensa en la posibilidad límite en que s tienda a infinito, resultaría de las ecuaciones (2.5.2) que $Q_i = \text{constante}$ para todo i de la misma forma que $P_s = \text{constante}$. El sistema tendría $N+1$ coordenadas cíclicas, lo que implica que las soluciones para s y para los P_i momentos son funciones crecientes monotónicamente en el tiempo, lo cual no tiene sentido alguno.

7. *Sistemas disipativos*

La idea de contactar al sistema con un baño térmico para simular mejor el sistema real ha sido usada por diferentes autores y de diferente manera. Algunos han descrito el entorno (baño) mediante un sistema de infinitos grados de libertad (CALDEIRA LEGGET, 1982). Nosé en cambio solo agrega un grado de libertad al problema. El sistema de ecuaciones es puramente dinámico en ambos casos.

Otras formulaciones, como la de Langevin, (o más genéricamente las ecuaciones de Fokker-Plank) usan fuerzas externas estocásticas para la descripción de la interacción del sistema con el medio, obligando a pasar por ecuaciones con términos en variables que se conocen solamente a través de su estadística.

Como se ha visto en la sección anterior, el formalismo de Nosé se puede aplicar directamente, con sólo poder describir al sistema con la función Lagrangiano. En el caso de los sistemas disipativos, se ha propuesto una función Lagrangiano adecuada, con la que se obtienen las ecuaciones de movimiento del sistema que se quiere analizar.

La cuestión de tratar a un sistema cuya ecuación de movimiento es del tipo

$$M\ddot{x} - \eta\dot{x} + \frac{\partial V}{\partial x} = F_{ext}(t) \quad (2.7.1)$$

con $V(x)$ que sólo depende de la variable x y η el coeficiente de fricción ha sido largamente tratado. El problema fundamental consisten en escribir una función lagrangiana acorde con (2.7.1)

Desde el punto de vista físico, el parámetro η (que en términos más genéricos sería una función $\eta(x)$) representa una función macroscópica de los procesos internos que se producen entre el sistema y el exterior lo que da lugar a la disipación de energía desde el sistema hacia el exterior. En esta descripción, el parámetro η es generalmente una cantidad medida experimentalmente, y el sistema será del tipo irreversible, es decir que la energía disipada por unidad de tiempo es $\eta\dot{x}^2$

Una posible descripción del mecanismo de la disipación es a través de la interacción con el exterior como un baño de osciladores armónicos.

El acoplamiento sistema-baño está representado por una ecuación del tipo:

$$\sum_j F_j(x)q_j \quad (2.7.2)$$

donde q_j es la coordenada de la posición de el j -ésimo oscilador armónico que integra el baño de osciladores, y la función $F_j(x)$ es una función genérica que representa la conexión con el sistema y puede depender de la coordenada del sistema x , y a lo sumo de algún parámetro (fijo) del sistema de osciladores.

En algunos casos es posible restringir $F_j(x)$ a una función lineal de x (acoplamiento lineal). En esta descripción, el fenómeno de la disipación es la transferencia de energía desde un grado de libertad caracterizado como 'sistema' a un conjunto de grados de libertad mucho más complejo que describen el 'entorno' o 'baño'. Se supone que la energía que entrega el grado de libertad al entorno, desaparece en él y no regresa al sistema, al menos en tiempos lo suficientemente largos dentro del interés físico.

Formalmente se asume que el número de grados de libertad del baño tiende a infinito, y para hacer manejable el sistema (en el sentido de poder

realizar aproximaciones que facilitan el cálculo), es necesario que cada uno de los grados de libertad del baño interactúen débilmente con el sistema, lo que no implica necesariamente que la interacción sea débil ya que el sistema interactúa con gran número de ellos. El entorno está representado por un conjunto de osciladores armónicos; cuyo lagrangiano es:

$$L_{\text{osc}} = \sum_j \left(\frac{1}{2} m_j \dot{q}_j^2 - \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 q_j^2 \right) \quad (2.7.3)$$

además aparece un término de interacción de la forma:

$$L_{\text{int}} = \sum_j F_j(x) q_j + \Phi(x) \quad (2.7.4)$$

siendo $\Phi(x)$ una función que proviene de la renormalización del potencial V (del sistema total) que resulta:

$$V_{\text{eff}}(q) = V(q) - \sum_j F_j^2(x) / (2m_j \omega_j^2) \quad (2.7.5)$$

y por lo tanto

$$\Phi(x) = \sum_j F_j^2(x) / 2m_j \omega_j^2 \quad (2.7.6)$$

el efecto de $\Phi(x)$ es cancelar el término de V_{eff} para evitar que el sistema total tenga una energía potencial más baja que el mínimo del potencial desacoplado.

Finalmente, el lagrangiano del sistema total resulta:

$$L = \frac{1}{2}M\dot{x}^2 - V(x) + \frac{1}{2} \sum_j \left(\frac{1}{2}m_j\dot{q}_j^2 - \frac{1}{2}m_j\omega_j^2 q_j^2 \right) - \sum_j F_j(x)q_j - \sum_j F_j^2(x)/(2m_j\omega_j^2) \quad (2.7.6)$$

El coeficiente de disipación, surge de aplicar las ecuaciones de Lagrange a (2.7.6) y es:

$$\eta(x) = \frac{\pi}{2} \sum_j \frac{1}{m_j\omega_j^2} \left(\frac{\partial F_j}{\partial x} \right)^2 \delta(\omega - \omega_j) \quad (2.7.7)$$

En el caso en que la función $F_j(x)$ sea lineal, es decir:

$$F_j = xC_j \quad (2.7.8)$$

el coeficiente de disipación es:

$$\eta = \frac{\pi}{2} \sum_j \frac{C_j^2}{m_j\omega_j^2} \delta(\omega - \omega_j) \quad (2.7.9)$$

Para usar este método hay que hacer suposiciones acerca de los parámetros m_j , C_j y ω_j , lo cual implica un conocimiento de la física microscópica del problema. Además, ciertas elecciones de la función $F_j(x)$, pueden acarrear problemas tales como coeficientes negativos (esto no ocurre nunca en el caso lineal). Es por lo tanto un método engorroso, aunque útil en algunos casos. Por otra parte, aparecen términos que son proporcionales a $(\omega_0^2 - \omega_j^2)^{-1}$, que introducen el problema de las resonancias para las frecuencias tales que anulen el denominador.

Capítulo 3

Aplicación del sistema de Nosé a tres casos sin disipación

El formalismo desarrollado en el capítulo 2, se aplicará a tres casos concretos: un oscilador armónico, un oscilador de Duffing (sin el término disipativo) y un sistema bidimensional no lineal: la red de Toda.

Estos tres sistemas son representativos de distintos tipos de osciladores. El primero es un caso lineal, que, al entrar en contacto con el reservorio térmico presenta comportamiento caótico. El sistema de Duffing tiene un potencial de tipo doble pozo, en el que se investiga el comportamiento de la partícula y sus tiempos de vida media en los pozos de potencial, además de comparar con el caso perturbado por una fuerza externa. Finalmente, el oscilador de Toda es un caso de oscilador no lineal integrable. Esta condición se pierde al entrar en contacto con el baño térmico y aparece una deformación y ruptura de las órbitas KAM.

1. El oscilador armónico

El Hamiltoniano del sistema oscilador armónico en contacto con el baño térmico, es:

$$H_N = \frac{P^2}{2S^2} + \frac{Q^2}{2} + \frac{P_s^2}{2\alpha} + \ln s \quad (3.1.1)$$

Se ha elegido m (masa de la partícula), k (constante del resorte) de manera que:

$m =$ unidad de masa

$(m/k)^{1/2}$ = unidad de tiempo

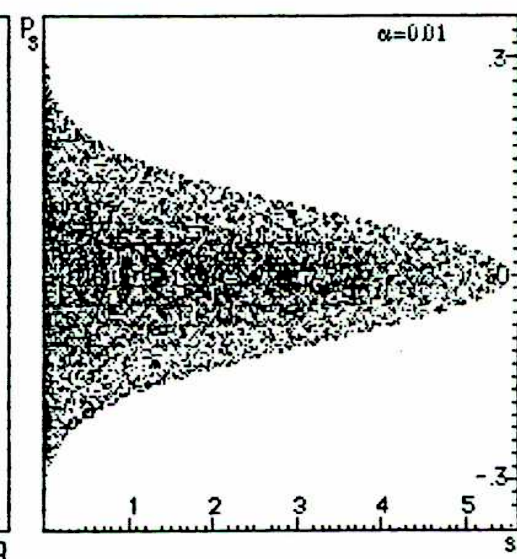
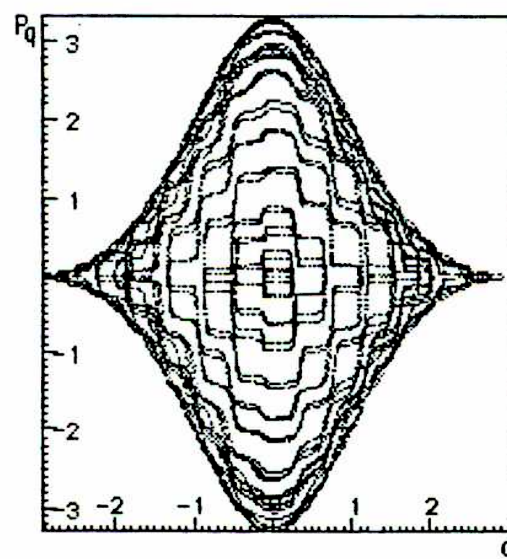
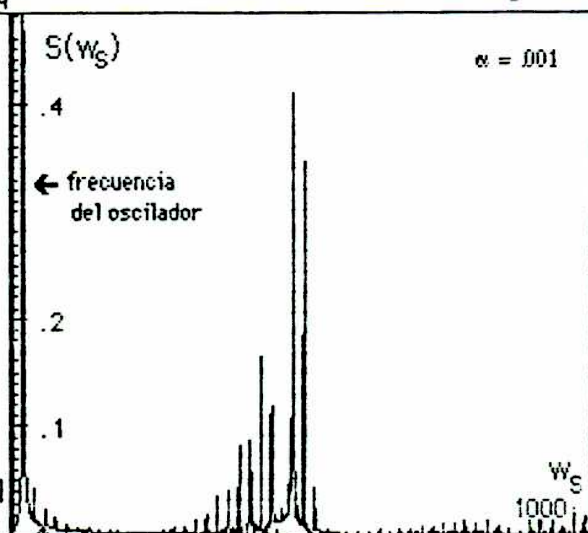
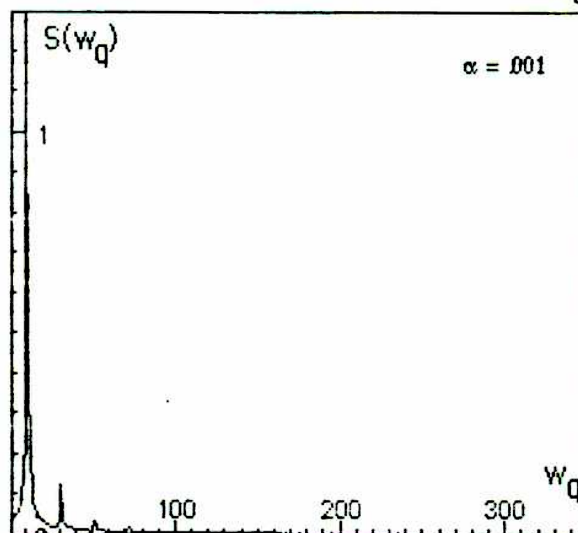
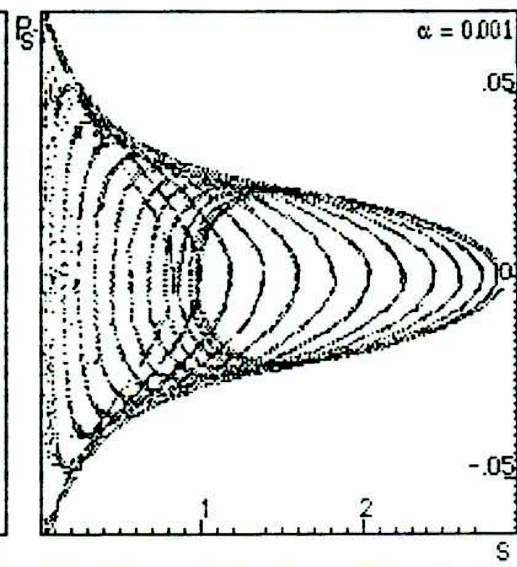
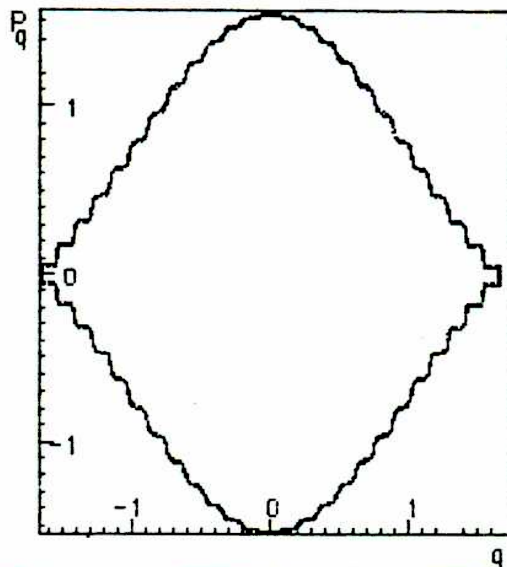
$(k_B T/k)^{1/2}$ = unidad de longitud de escala

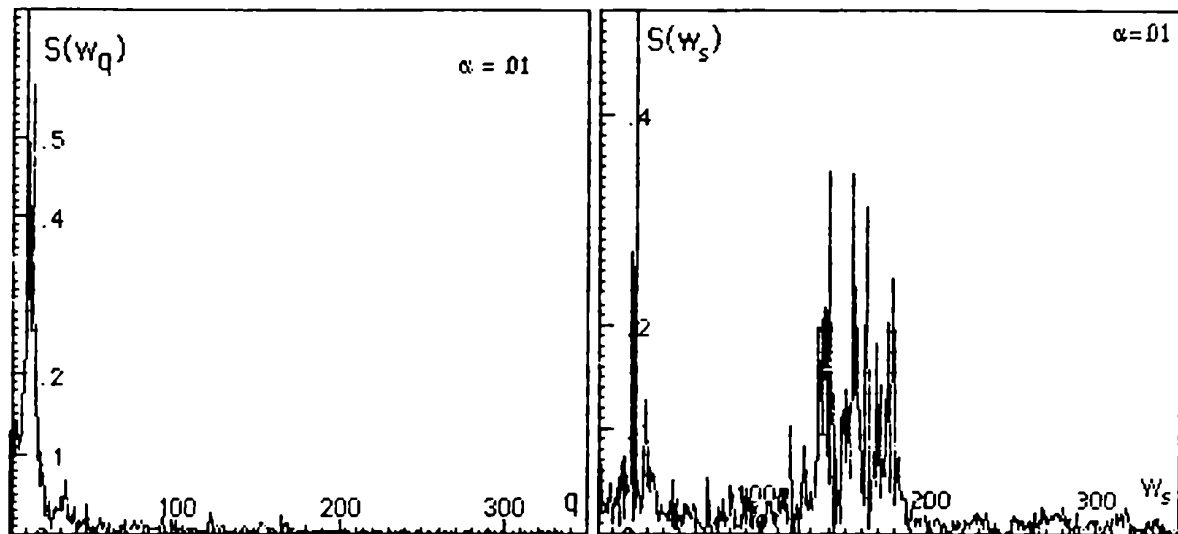
Con esta elección de las constantes, las ecuaciones de movimiento son:

$$\dot{Q} = \frac{P}{s}, \dot{P} = -Qs$$

$$\dot{s} = \frac{sP_s}{\alpha}, \dot{P}_s = \frac{P_s^2}{s^2} - 1 \quad (3.1.2)$$

Se trabajó integrando las ecuaciones de movimiento, para distintos valores de la masa inercial del baño α . Los siguientes retratos de fase, muestran el comportamiento del sistema oscilador y del baño térmico al variar la masa inercial α . En los siguientes casos los valores iniciales son: $q_0=0.0$, $p_0=1.55$, $s=1.0$, $p_s=0.0$, de acuerdo con (3.1.1) el sistema tiene a una energía total de $E=1.2$ (en las unidades correspondientes). Se varía α de 0.001 hasta 100. Los gráficos que están a la izquierda corresponden en todos los casos al oscilador, mientras que los que están a la derecha al baño térmico. En ambos casos se grafica impulso lineal versus posición, para las dos variables canónicas conjugadas. Cada par de gráficos tienen al mismo valor de α .

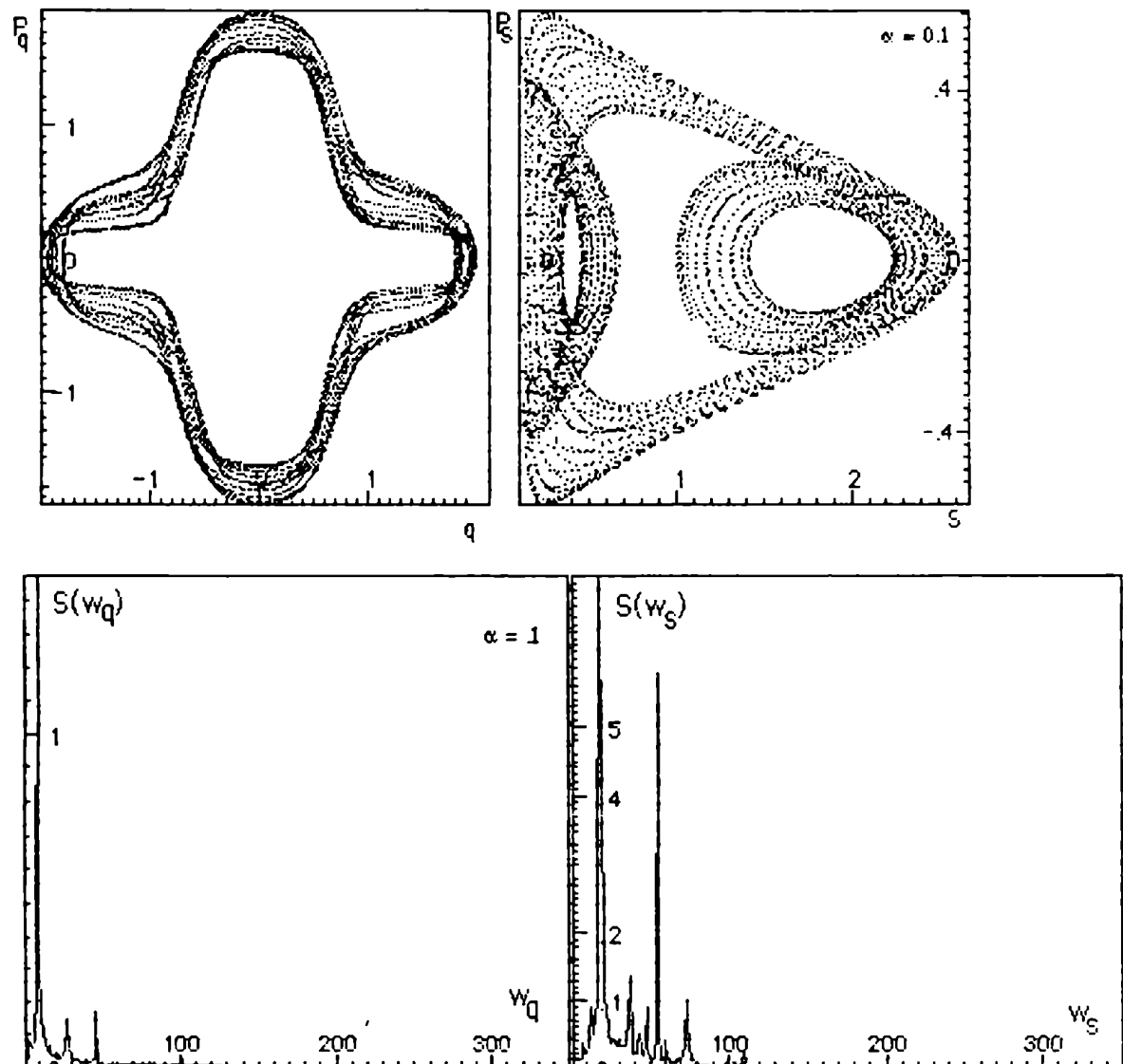




Para α pequeños, $\alpha \ll 1$, (en este caso se ejemplificará con $\alpha = 0.001$), el baño térmico reacciona ante la presencia del oscilador quien altera muy poco las frecuencias propias del mismo. La órbita se deforma pero mantiene una frecuencia típica, lo que se observa en el correspondiente espectro de potencias. Dicho en otras palabras, los tiempos involucrados en la dinámica de uno y otro sistema son tan distintos que el oscilador se ve poco afectado por el baño térmico. Sin embargo el baño acusa la presencia del oscilador que se muestra con la aparición de cuasiperiodicidades. Este proceso se incrementa a medida que el valor de α aumenta, pero ahora también afecta al oscilador (ver $\alpha=0.01$). Para este valor del parámetro α , el comportamiento cuasiperiódico de los valores más pequeños de α , desemboca en el caos, lo que se muestra en los espectros de potencia y en los retratos en fase.

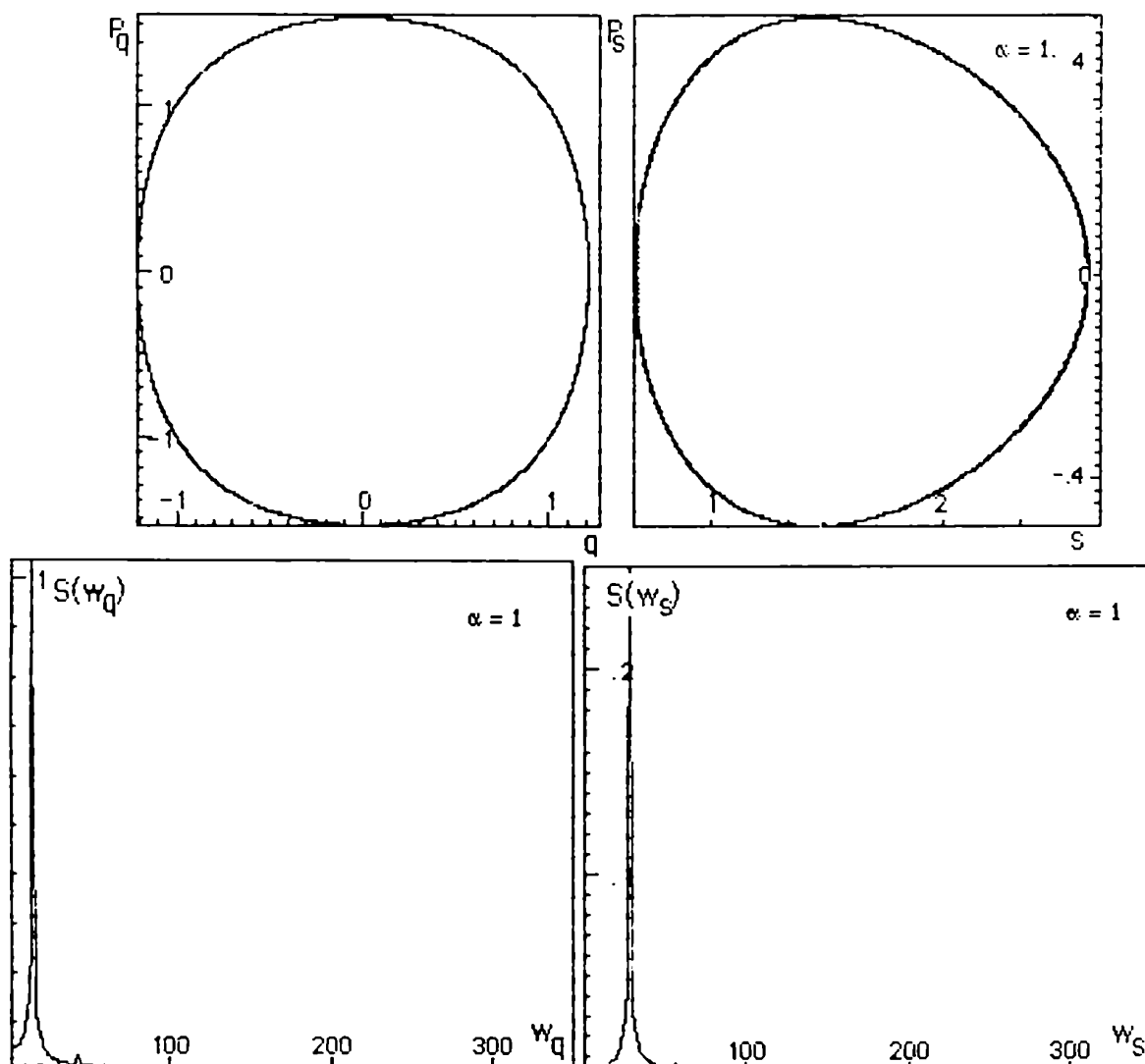
De la situación caótica se vuelve a la cuasiperiodicidad (ver $\alpha=0.1$). Comienzan a sincronizarse las frecuencias de uno y de otro

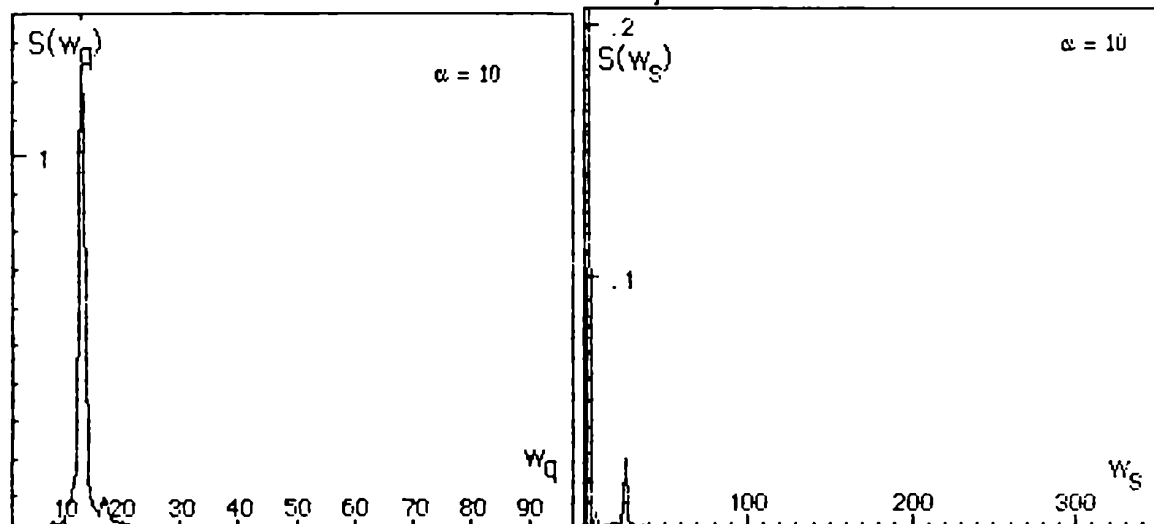
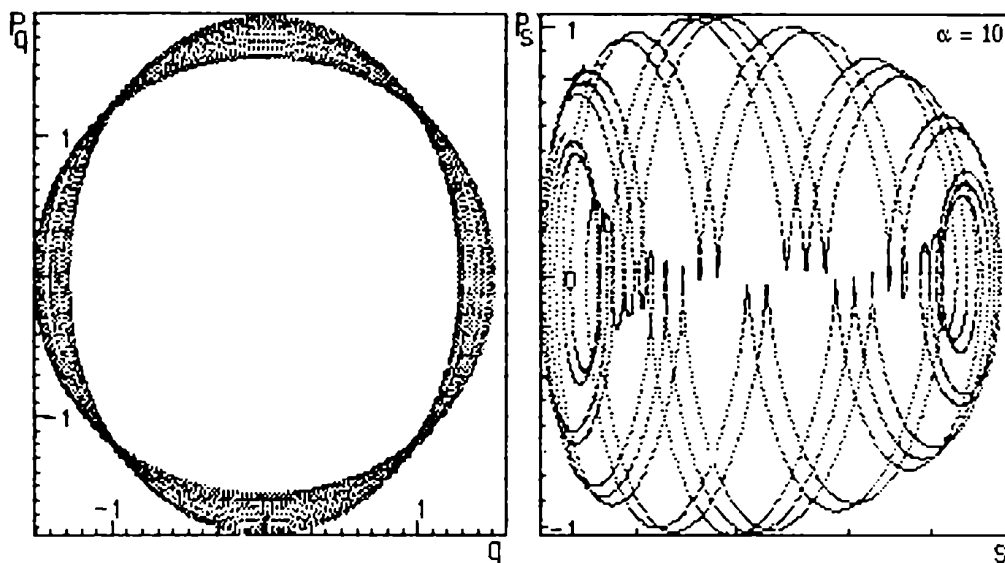
sistema, hasta llegar al caso de $\alpha=1$ en el es perfecta la sincronización de las frecuencias propias del oscilador y del baño. Los sistemas muestran un ciclo límite, tal como se ve en la figura de $\alpha=1$

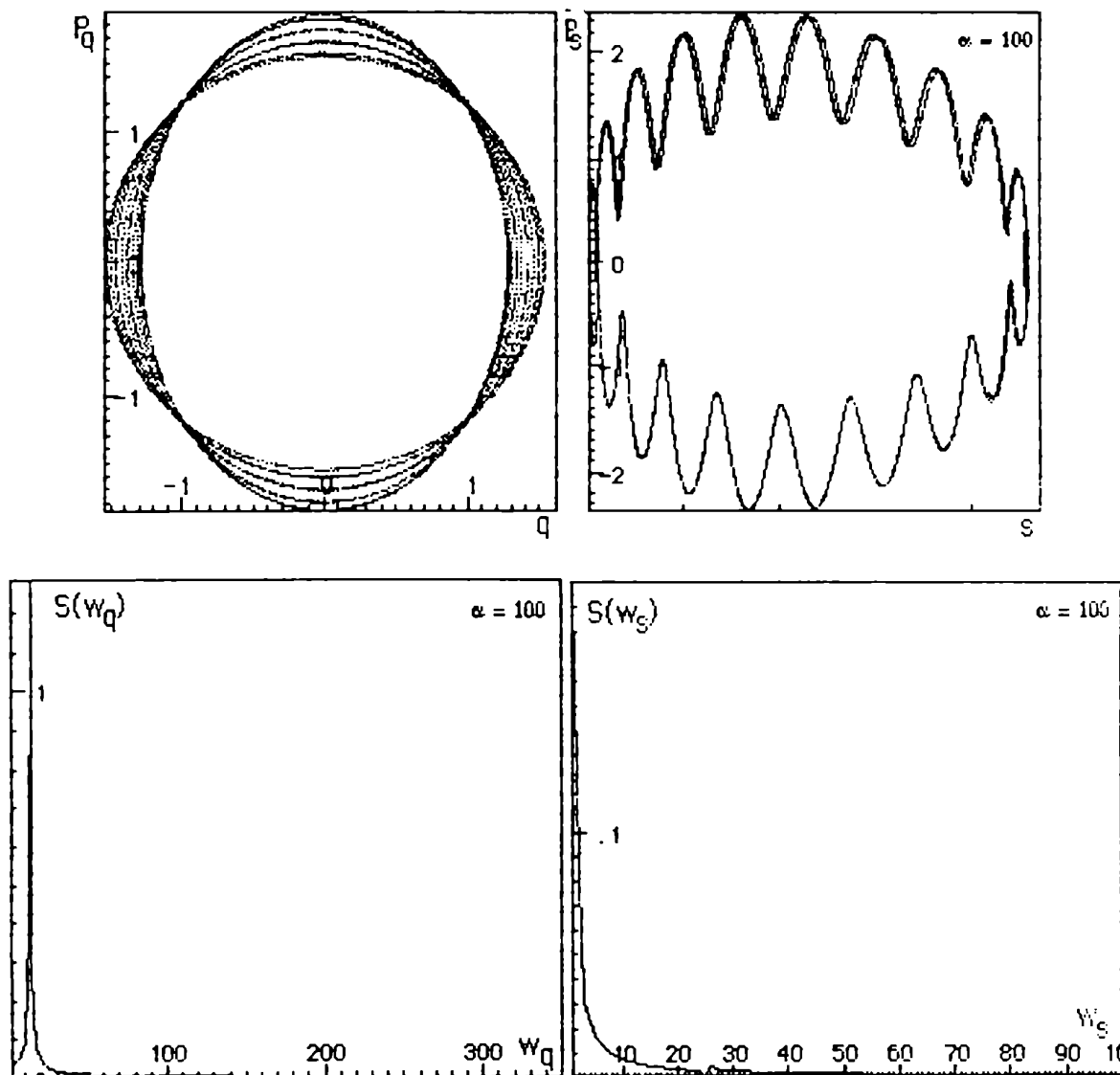


De las ecuaciones (3.7.1) y para $\alpha \rightarrow \infty$, s tiende a una constante de movimiento, lo que hace que en el baño aparezca una variable cíclica. Notesé que la aparición de una constante de movimiento en el caso

límite es independiente del tipo de potencial. El oscilador se comporta como si no existiera el baño, y oscila con una velocidad angular en las unidades del sistema. Físicamente, lo que ocurre es que el baño tarda tanto en reaccionar, que no llega a alterar al oscilador. Estos comportamientos ya comienzan a verse reflejados en los casos $\alpha=10$ y en $\alpha=100$.







Los espectros de potencia se presentan debajo de los correspondientes retratos de fase (para las mismas condiciones iniciales y de parámetros). Se han calculado los espectros del oscilador y del baño térmico por separado, usando para el primer caso la coordenada q (posición) del oscilador, y para el segundo caso la variable s . En todos los casos se ha trabajado con una serie de 4000 puntos equiespaciados, mientras que los retratos en fase son graficados con 10000 pares de datos (x, P_x) y (s, P_s) .

Los gráficos de la izquierda corresponden al espectro de potencia de la variable q (posición) del sistema, mientras que los otros a la variable s del baño.

Para valores pequeños de α , la frecuencia propia y sus armónicas del sistema aparece en el espectro del baño térmico, cuyo fondo ruidoso es propio del comportamiento caótico.

Cuando α crece, comienza un corrimiento en las frecuencias del baño térmico (notar que hay distintas escalas). El grupo de armónicas principales que están en 550 para $a = 0.001$ pasan a 157 en $a = 0.01$ donde ya interactúan con el oscilador que a su vez produce un corrimiento de su pico principal, haciendo que el baño se vuelva caótico.

Las últimas gráficas muestran que el comportamiento se vuelve periódico a medida que el valor de la masa inercial aumenta. Esta situación es también analizada con el cálculo de los exponentes de Lyapunov.

1.2 Cálculo de los exponentes de Lyapunov

Para el cálculo de los coeficientes de Lyapunov se ha utilizado el método propuesto por Eckmann et al (ECKMAN, 1986) que da el espectro de los coeficientes (en este caso 4). Hay que recordar que se está trabajando con un sistema que en su totalidad es conservativo, por lo que la suma algebraica de todos los coeficientes debe ser igual a cero. En la práctica, da un número del orden de 10^{-4} , y los coeficientes que en módulo son menores o iguales que dicho número se los considera cero. (GREBOGI, C., 1984) Para el oscilador armónico aparecen

coeficientes de Lyapunov levemente positivos, lo que habla de situaciones caóticas. Esto fue calculado en los casos donde los espectros de Fourier muestran alta periodicidad con un fondo de ruido blanco que es típico de las situaciones caóticas. También se ha hecho el cálculo para el sistema oscilador por un lado y para el sistema baño por el otro (considerando un sistema de dos por dos), sin obtenerse variaciones notables. La única zona donde se detectó presencia de caos fue en torno a $\alpha = 0.01$ cuyo coeficiente máximo de Lyapunov es de 5.4×10^{-3} . Los otros casos analizados son periódicos o cuasiperiódicos.

Para corroborar esta situación se intentó calcular las dimensiones características basándose en el algoritmo de Grassberger-Procaccia. Cabe aclarar que el sistema total no es un atractor caótico. Como se vió en el primer capítulo, la idea de atractor está asociada a un sistema disipativo, el cual, a tiempos muy largos contraerá su volumen hasta hacerlo tender a cero. Este no es el caso, ya que el sistema total es conservativo. Pero puede estudiarse sólo el sistema oscilador, que ya no será conservativo, pues intercambia energía con el medio. Como el algoritmo de G-P reconstruye el atractor con una serie numérica, se utilizó para ello la serie proveniente del oscilador.

Los resultados indican que el sistema no puede tratarse con este método, ya que no se halla una buena zona en que las pendientes de las curvas $\log(C(r))$ vs $\log(r)$ para distintos valores de la dimensión de encastre p , resulten paralelas entre sí. Aparecen grupos paralelos entre sí pero por zonas y con distintas pendientes. De acuerdo con lo discutido en el capítulo 1, este comportamiento obedece a que no es posible describir la situación con una sólo dimensión, sino a que tiene características de multifractal.

Conclusión

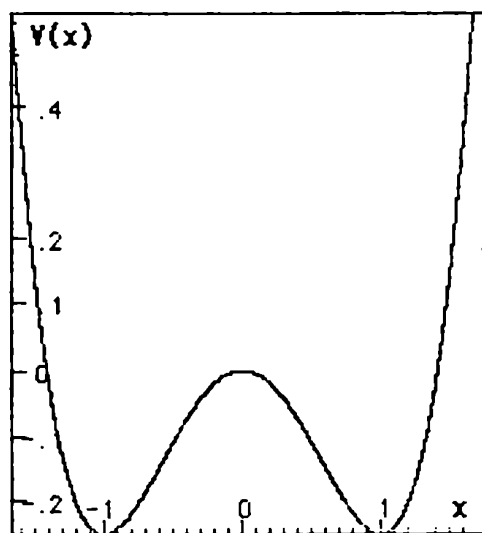
La conexión de un reservorio térmico como el presentado a un sistema tan simple como el oscilador armónico, lleva a situaciones tan complicadas que, para determinados parámetros, son caóticas. Esto es confirmado usando las técnicas propias del análisis no lineal (espectros de potencia, cálculo de los exponentes de Lyapunov y de las dimensiones de correlación).

Para alfas pequeños, el baño interactúa débilmente con el sistema, y la mayor parte de la energía total está en el oscilador. La reacción del baño para mantener la temperatura constante es tan rápida que produce una destrucción de las órbitas del mismo, lo que implica un cubrimiento ergódico del semiespacio (s, P_s) .

La ruta al caos es a través de cuasiperiodicidades (escenario de Ruelle-Newhouse-Takens) y puede verse que aparece una zona caótica alrededor de $\alpha=0.01$. Luego, la situación se torna periódica y el baño se sincroniza con el oscilador. Para $\alpha \gg 1$, aparece una constante de movimiento en el sistema que hace que el reservorio térmico se mueva cíclicamente. Esta última situación es válida para cualquier oscilador que se estudie, ya que es propia de la dinámica de Nosé.

2. El modelo de Duffing

El modelo que se analizará, tiene la particularidad de un potencial de doble pozo (en este caso simétrico). Esto da lugar a que se planteen situaciones interesantes tales como cual es el tiempo típico de vida media de la partícula dentro del pozo. Además corresponde a un sistema no lineal que puede entrar en caos, bajo determinadas condiciones. La forma del potencial se muestra en la figura.



El potencial es:

$$V(x) = \mu \frac{x^4}{4} - \beta \frac{x^2}{2} \quad (3.2.1)$$

Este potencial tiene dos puntos fijos estables, $x = -(\beta/\mu)^{1/2}$ y $x = +(\beta/\mu)^{1/2}$ y un punto fijo inestable en $x = 0$. Si la energía inicial es tal que la partícula se encuentra dentro de alguno de los pozos (energías entre 0 y $-\beta^2/4\mu$), aparecerán libraciones en torno al correspondiente punto fijo estable, y el movimiento será cíclico, sin posibilidades de escapar de dicho pozo. (Recordemos que el tratamiento que se realiza es puramente clásico). Por el punto fijo inestable ($x=0$) pasa una separatriz, y para energías mayores que cero el sistema describirá una órbita cerrada en torno a $x=0$. En todo el análisis que sigue se trabajó con $\beta = 1$ y $\mu = 1$.

Al poner este sistema en contacto con un reservorio térmico, la partícula puede escapar del pozo, ya que el baño puede entregarle la energía necesaria. El problema ha sido (y es) estudiado desde la formulación siguiente: un sistema descrito por un potencial de doble pozo, al cual se lo excita con una fuerza externa de tipo estocástica.

Sin embargo, en este trabajo se seguirá la línea propuesta por Nosé, aplicada a un sistema con un potencial de pozo doble como el mencionado anteriormente.

Las ecuaciones correspondientes, de acuerdo con (2.5.2) son:

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= \frac{P}{s}, \quad \dot{P} = (-Q^3 + Q)s \\ \dot{s} &= \frac{sP_s}{\alpha}, \quad \dot{P}_s = \frac{P^2}{s^2} - 1 \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

eligiendo las constantes tales que

$m =$ unidad de masa

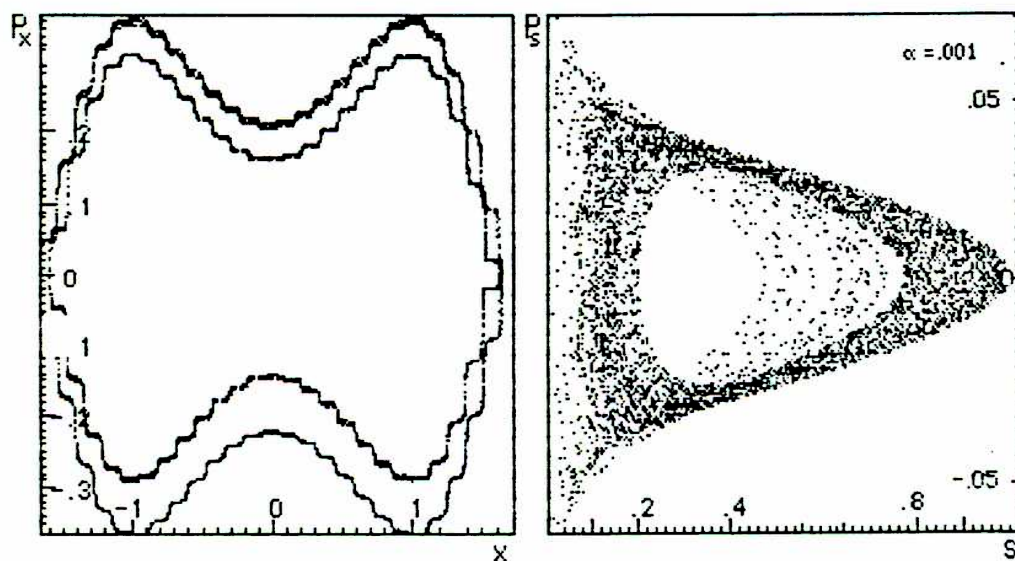
$(m/k)^{1/2} =$ unidad de tiempo

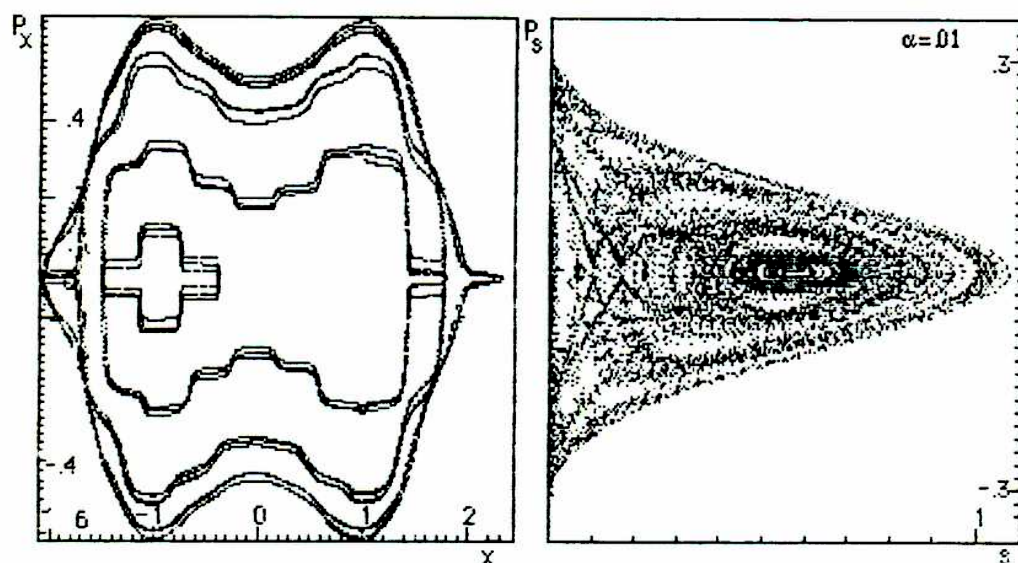
$(k_B T/k)^{1/2} =$ unidad de longitud de escala

Se trabajó este sistema variando la energía inicial y variando el parámetro alfa (masa inercial del reservorio térmico). También en este caso es posible, gracias a la integral de movimiento, reducir el sistema a tres ecuaciones con tres incógnitas, como se muestra en (2.5.7), pero esta síntesis provoca confusión en la interpretación de los datos. Salvo que se indique lo contrario se trabajó con el sistema (3.2.2).

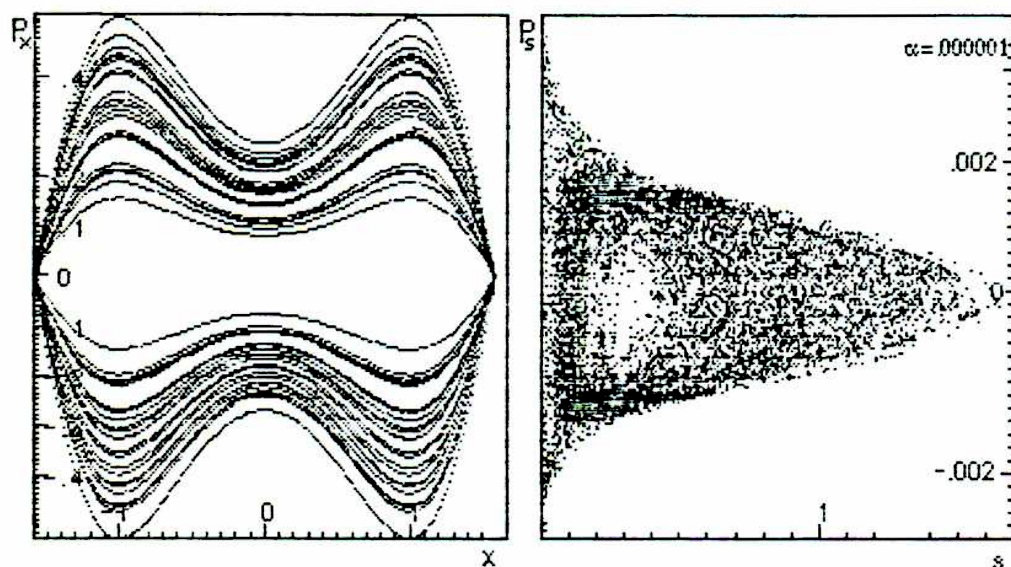
a) Variación de la masa inercial alfa

Se varió el coeficiente de masa del reservorio, para observar cambios en el sistema. Las condiciones iniciales son: $x=1$, $P_x=.3$, $s=1$, $P_s=0$, lo que corresponde a una energía $E = -205$. Las siguientes figuras muestran los retratos de fase para distintos valores de alfa.

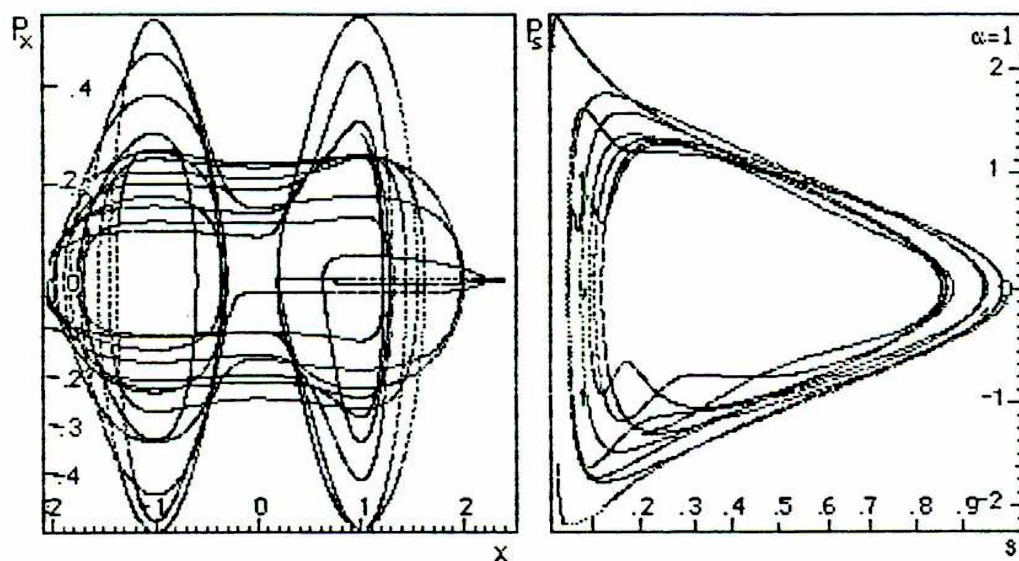


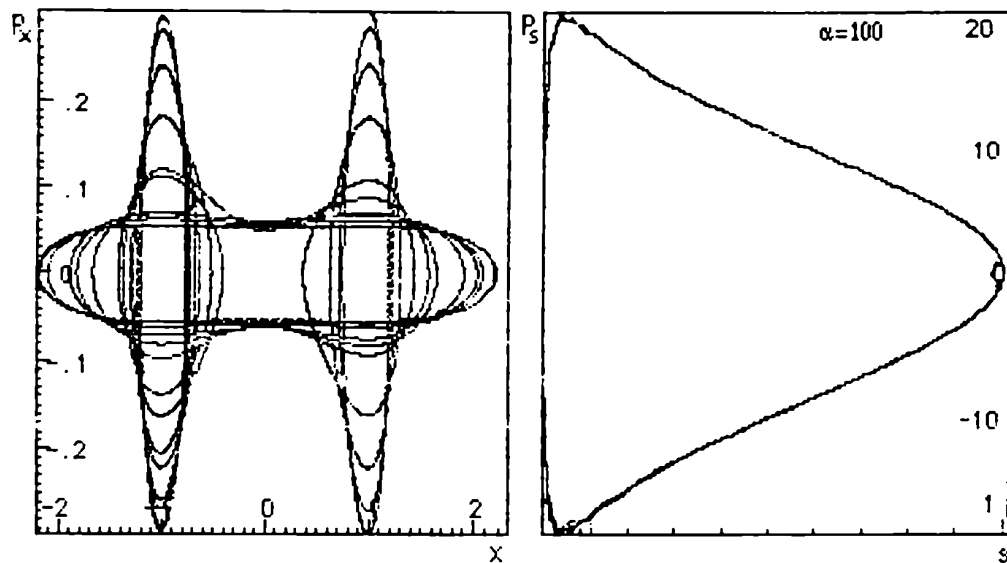


Para estas condiciones iniciales, el baño térmico tiene una energía inicial igual a la profundidad del pozo ($E=.25$). En todos los casos, la partícula puede escapar del pozo, gracias a la energía cinética que le entrega el baño térmico. Para valores pequeños de α , el baño térmico entrega casi toda su energía al oscilador, el cual puede escapar del pozo, reduciendo el movimiento de la partícula a una libración en torno al punto fijo inestable. El tipo de movimiento que realiza no cambia, es decir que el reservorio térmico no altera el tipo de órbita que describe (casos par $\alpha \ll .001$). El reservorio destruye sus órbitas totalmente y se comporta ergódicamente. Cabe señalar, que el sistema puede ser ergódico, pero no mixing. Es ergódico en el sentido que cubre todo el semi-espacio de fases (P_s, s). Sin embargo, este cubrimiento se hace de manera regular. Esto se deduce del cálculo de la función de autocorrelación (temporal), la cual decae lentamente. Por lo tanto el sistema tiene "memoria" del paso anterior.



Cuando α crece, la partícula puede variar su movimiento rotando en torno a distintos puntos fijos, saliendo y entrando en cada pozo. Las diferencias entre uno y otro caso se notarán cuando se traten las vidas medias en el pozo de potencial.



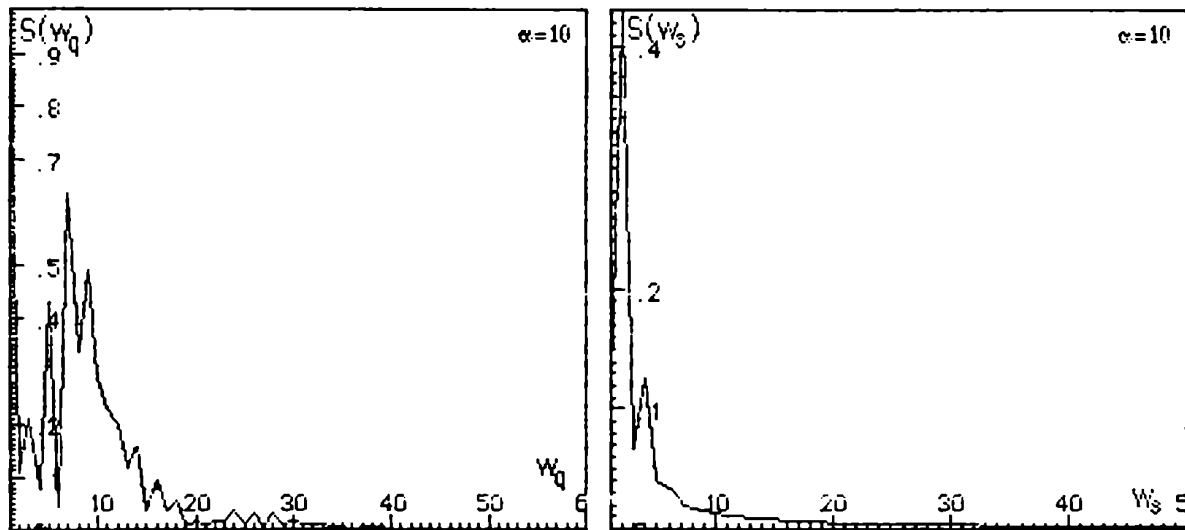


Para valores de $\alpha \gg 1$, el sistema reservorio adquiere una gran energía cinética, a expensas del oscilador que queda atrapado en los pozos de potencial pudiendo saltar de uno a otro en forma cíclica, cuando el baño le entrega energía para hacerlo. Como se vió en el punto anterior, para valores muy grandes de alfa, el baño se comporta cíclicamente cualquiera sea el sistema con el que interactúe.

Espectros de Potencia

Se han calculado los espectros de potencia para distintos valores de α , siguiendo la idea de calcular en paralelo los espectros de potencia para la coordenada q del oscilador y para la coordenada s del baño. Los espectros muestran la forma en que el sistema va al caos. De la combinación de el período propio del sistema y el del reservorio, surgen inestabilidades que conducen al caos.

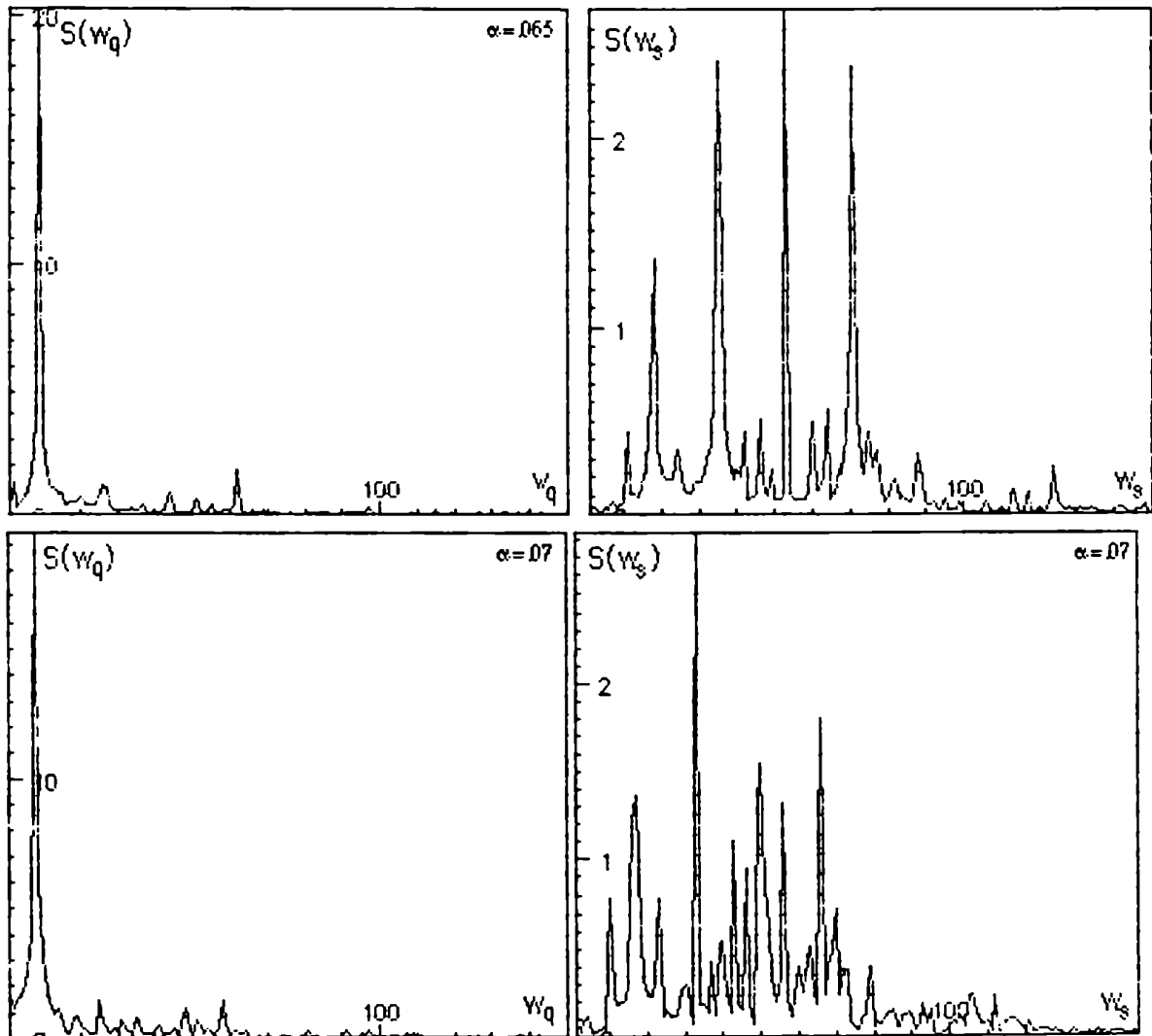
Este gráfico muestra una situación típica: las armónicas propias de cada sistema se ensanchan por aparición de otra frecuencia que incide sobre el mismo. Las situaciones serán caóticas o no, de acuerdo a la sincronización de ambos períodos.

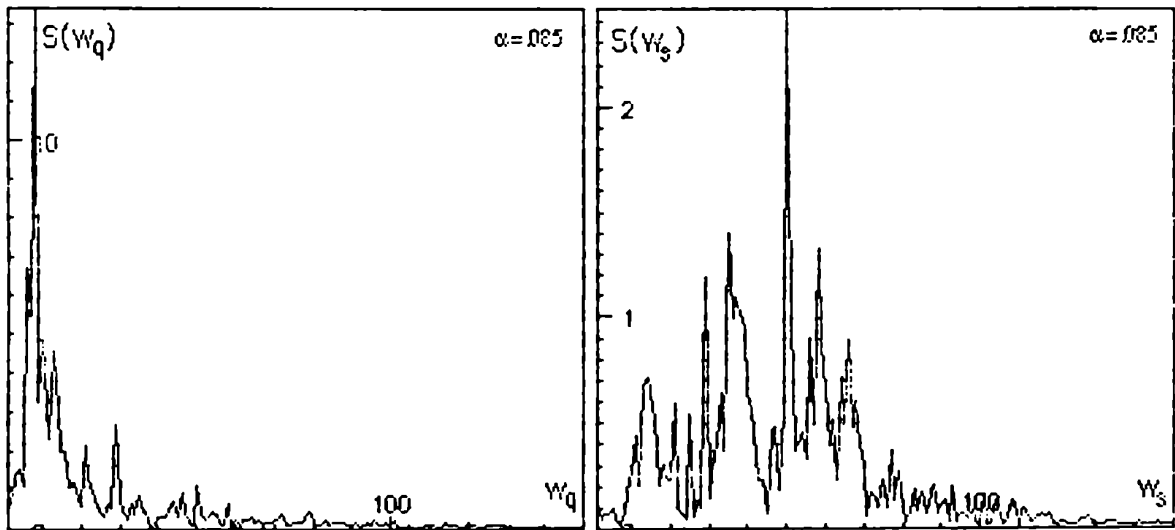
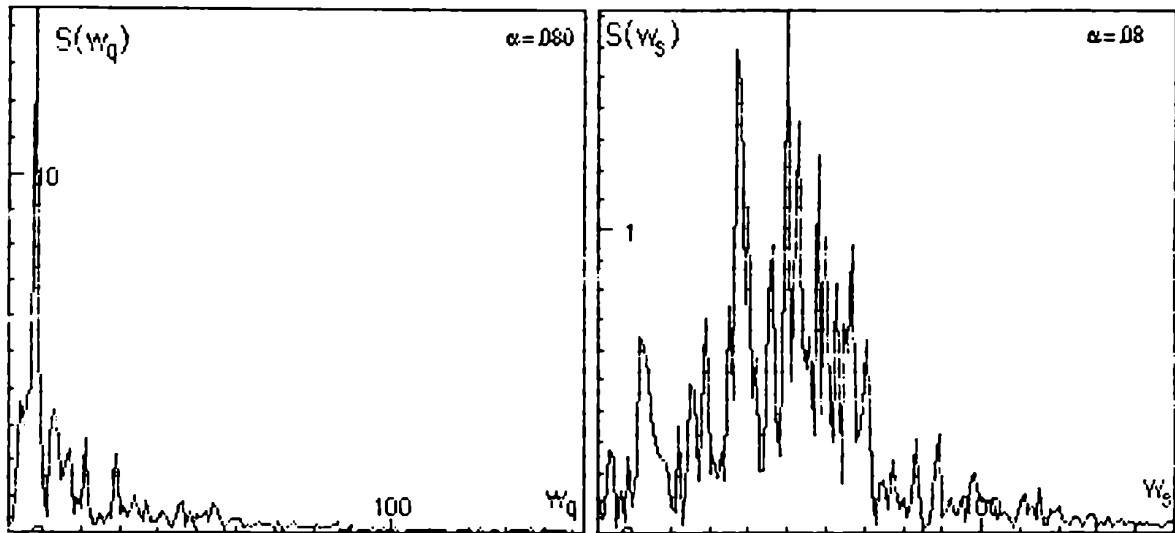


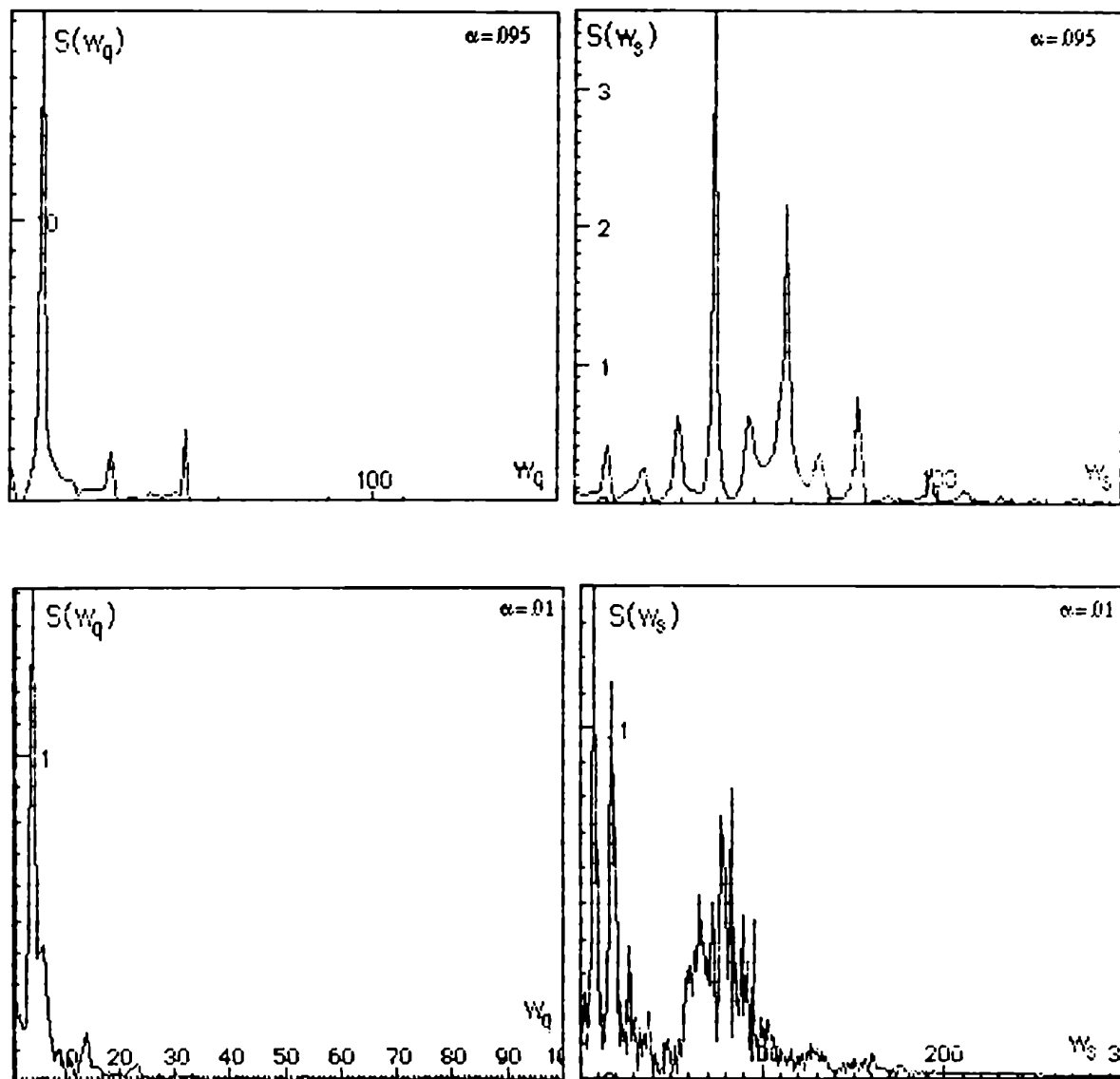
A la izquierda se muestran los espectros de potencia correspondientes al valor de la posición del oscilador y los de la derecha al valor de la variable s del baño térmico. Para $\alpha = .065$ y también para $\alpha = .095$, el sistema muestra que además de su frecuencia principal, que corresponde a la armónica $\omega = 10$ tiene periodicidades en $\omega = 1, \omega = 29$ y $\omega = 49$, mientras que el baño térmico presenta un comportamiento cuasiperiódico con los mayores picos en $\omega = 39, \omega = 59, \omega = 29$ y $\omega = 10$. Se observa que estos picos no son subarmónicas del pico principal pues no son múltiplos de éste. Ante pequeñas variaciones de α , estas frecuencias se multiplican llevando al sistema a una situación caótica. La ruta es la descrita por Ruelle, Newhouse y Takens .

En $\alpha = .095$, el sistema vuelve a una situación cuasiperiódica, y al incrementar α , se torna nuevamente caótica. El oscilador se comporta

alternadamente, pasando por situaciones periódicas, cuasiperiódicas y caóticas.



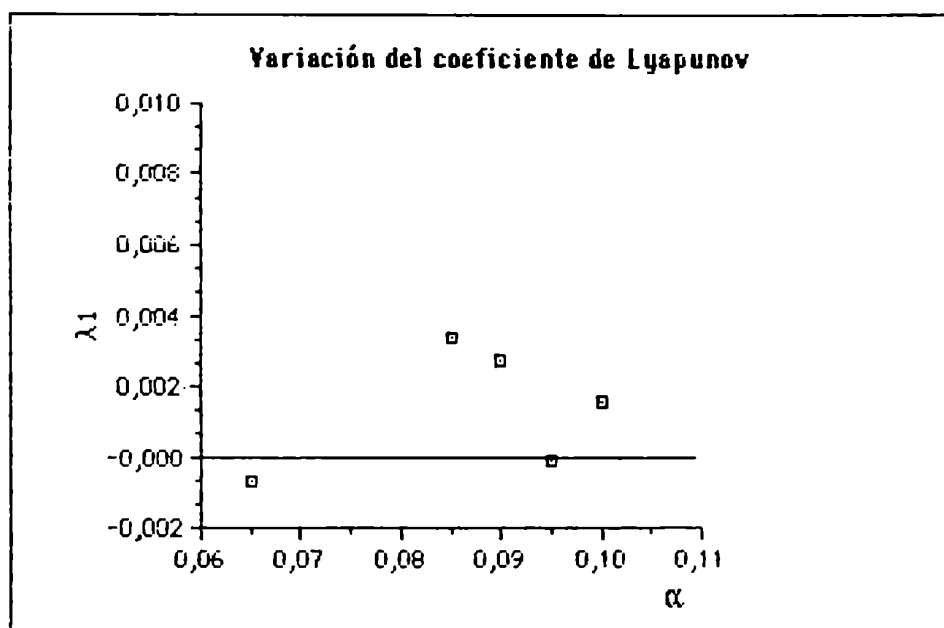




Para $\alpha \gg 1$, nuevamente el baño térmico se comporta en forma totalmente periódica, de la misma forma que en el caso del oscilador armónico, lo cual es totalmente razonable si se piensa en que al ser la masa inercial muy grande, el reservorio no distingue entre un sistema y otro. Sin embargo, el oscilador lineal presenta comportamientos totalmente distintos que el no lineal, apareciendo en este último comportamientos cuasiperiódicos, aún para valores de α bastante altos ($\alpha = 100$).

Coefficientes de Lyapunov

La siguiente gráfica muestra la variación del mayor coeficiente de Lyapunov, para la zona estudiada más arriba, variando α entre 0.065 y 0.10. Los valores observados coinciden con lo que indican los espectros de potencia, obteniendo el máximo valor de λ para $\alpha=0.080$.

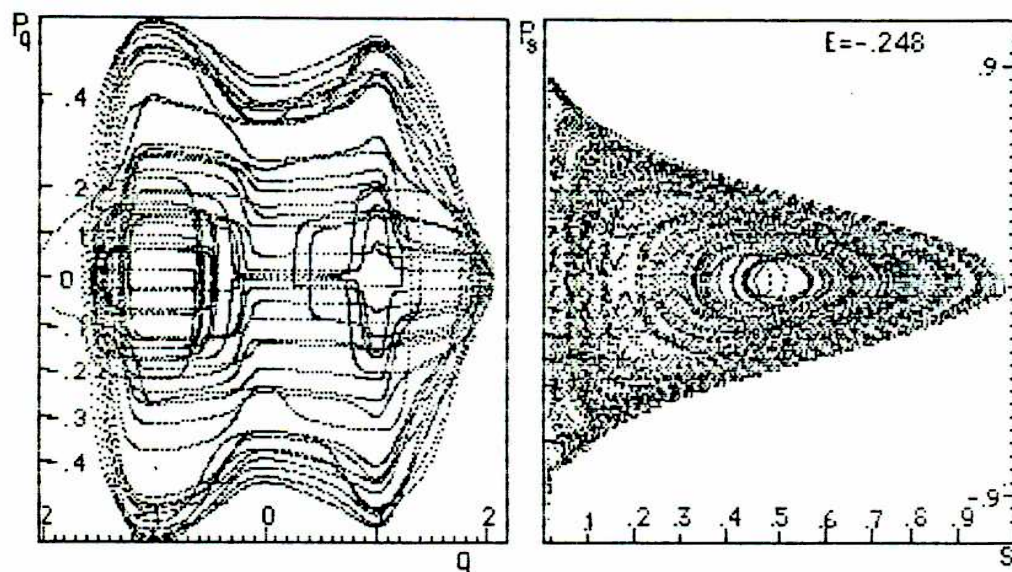


El cálculo se realizó sobre todos los coeficientes de Lyapunov. Se verifica que la suma de ellos es igual a cero. Por supuesto que no es cero estrictamente sino que se considera cero a 10^{-4} , que es el error con que se trabaja. Este criterio es el que en general, otros autores adoptan. (GREBOGI, 1984)

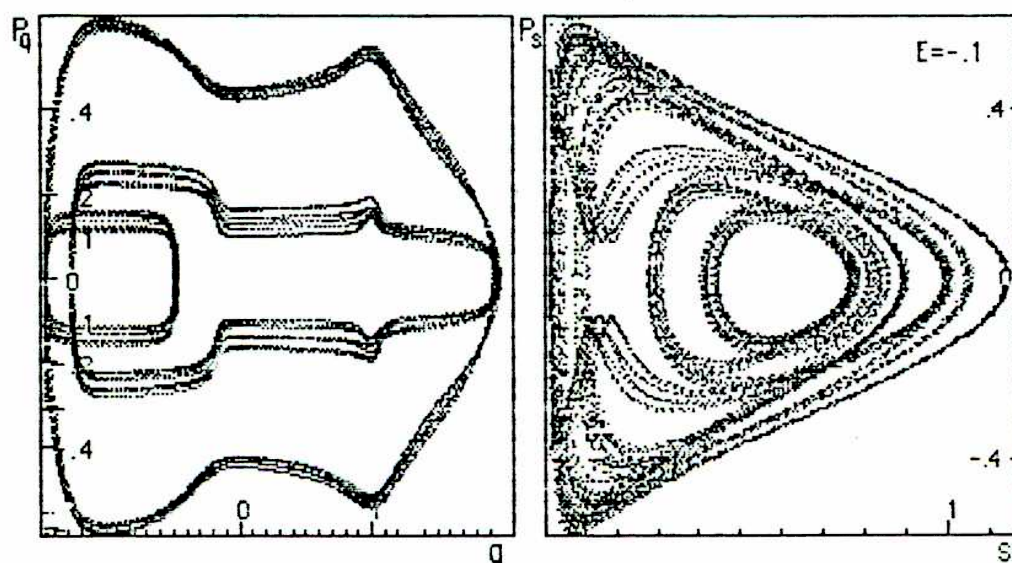
b) Variación del comportamiento con respecto a la energía

Debido a que la energía total del sistema, esto es: oscilador más reservorio, se conserva; es posible estudiar el comportamiento variando la energía total, de la misma forma que se varía un parámetro. Esta variación de la energía no es más que una variación en las condiciones iniciales. Las diferencias serán para el caso en que la partícula esté inicialmente dentro o fuera del pozo de potencial.

Las siguiente serie de figuras muestra como varía el sistema, a distintas energías. Para $E = -0.25$, es decir el valor mínimo de energía posible, el sistema queda atrapado en un punto fijo. Apenas un valor levemente mayor, hace evolucionar al sistema de manera distinta. En este sentido, se encontró que no existe un valor umbral de energía para que el sistema a partir del cual el sistema se comporte con trayectorias caóticas, dependiendo esto último de la variación de la energía en combinación con la masa inercial alfa. Para los gráficos que siguen, $\alpha=1$, y el valor inicial de $q=1$, $s=1$ y $P_s=0$. El valor del impulso p se obtiene como función de la energía y de q , s y P_s .

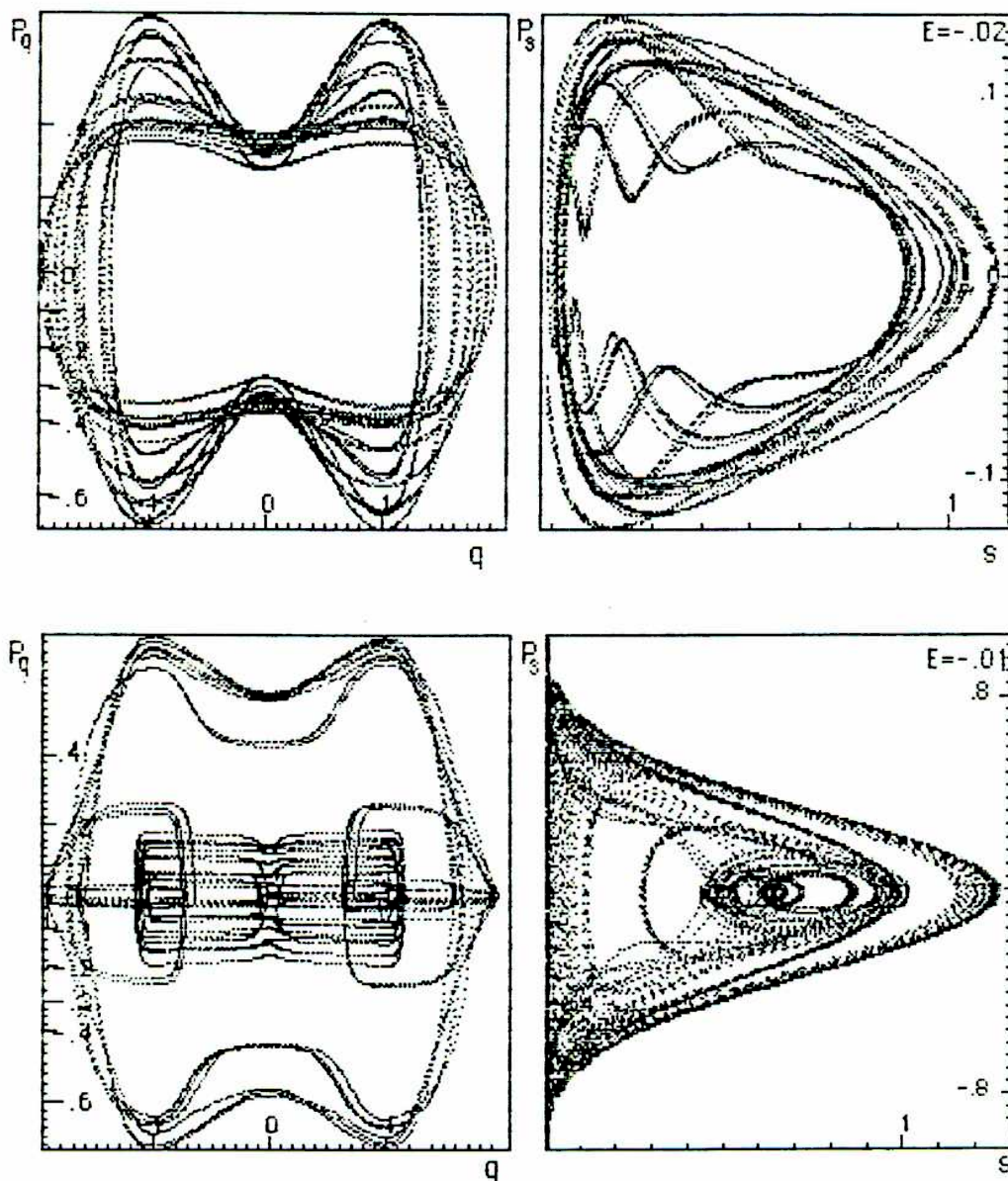


Notese, que para una $E = -0.1$, el sistema es cuasiperiódico, con tres frecuencias fundamentales: la partícula cicla dentro del pozo en un entorno del valor de potencial y fuera del pozo para otros dos valores.



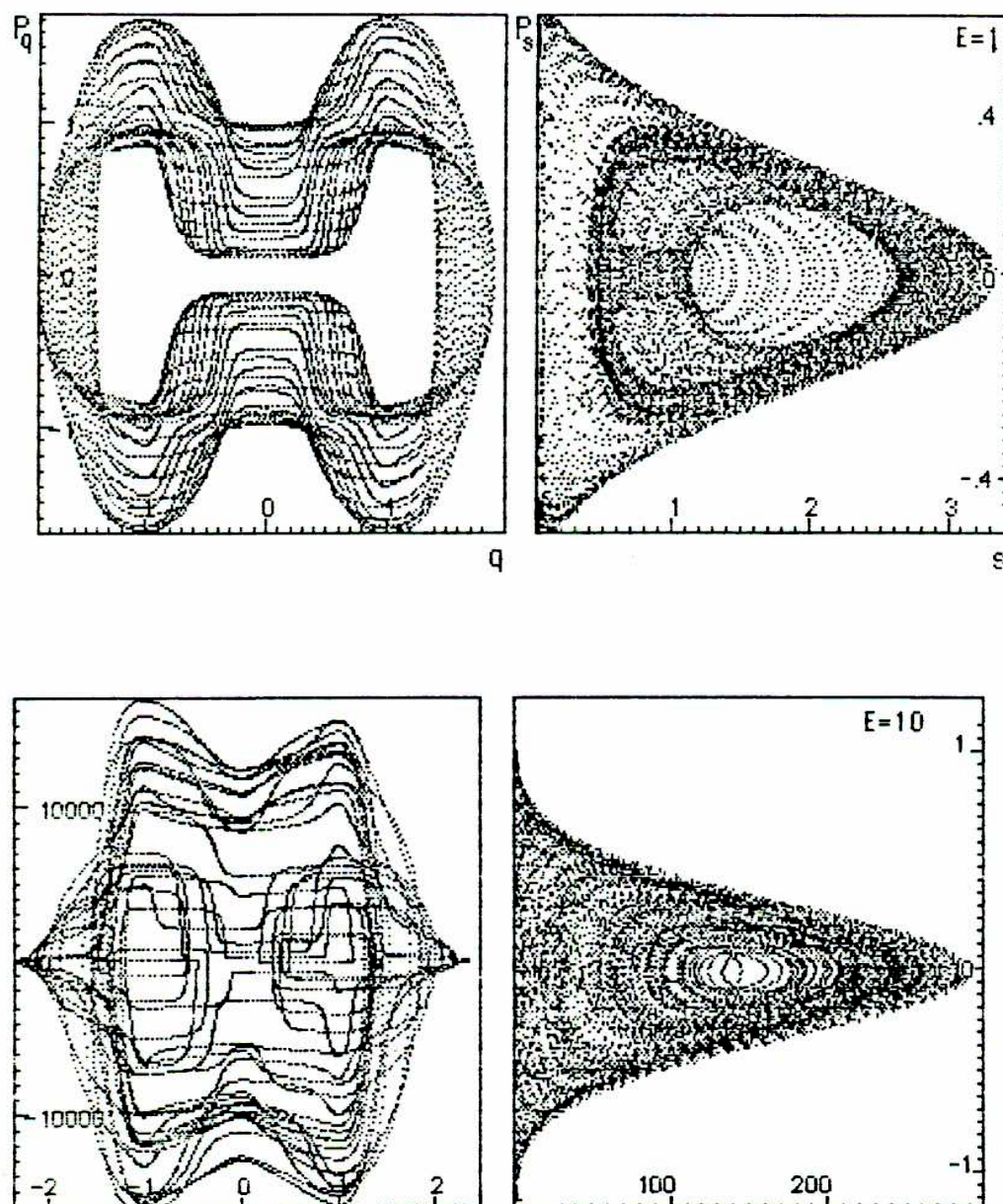
Estos valores corresponden a la zona cercana a $E=0$, donde aparece la separatriz. En $E=-0.02$, la partícula sale del pozo y ya no regresa a

él sino que cicla en torno al punto fijo inestable. En cambio si $E=-0.01$, la partícula entra y sale del pozo, generando una órbita más compleja.

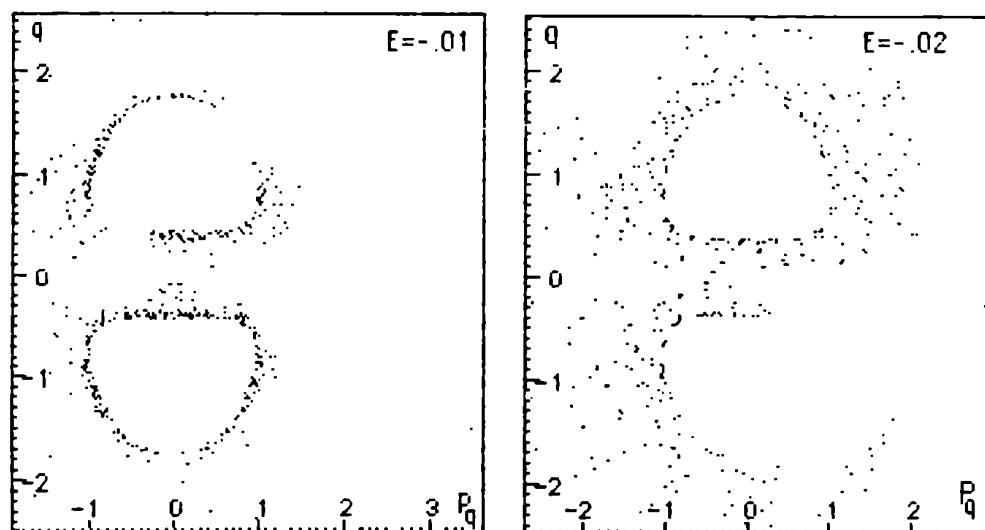


Para $E=1$, la partícula describe una órbita en torno al punto fijo $q=0$, sin meterse dentro de los pozos. En cambio, para energías mayores, la partícula deambula por todo el espacio de fases, adquiriendo una gran energía cinética, mientras que el baño mantiene su energía ci-

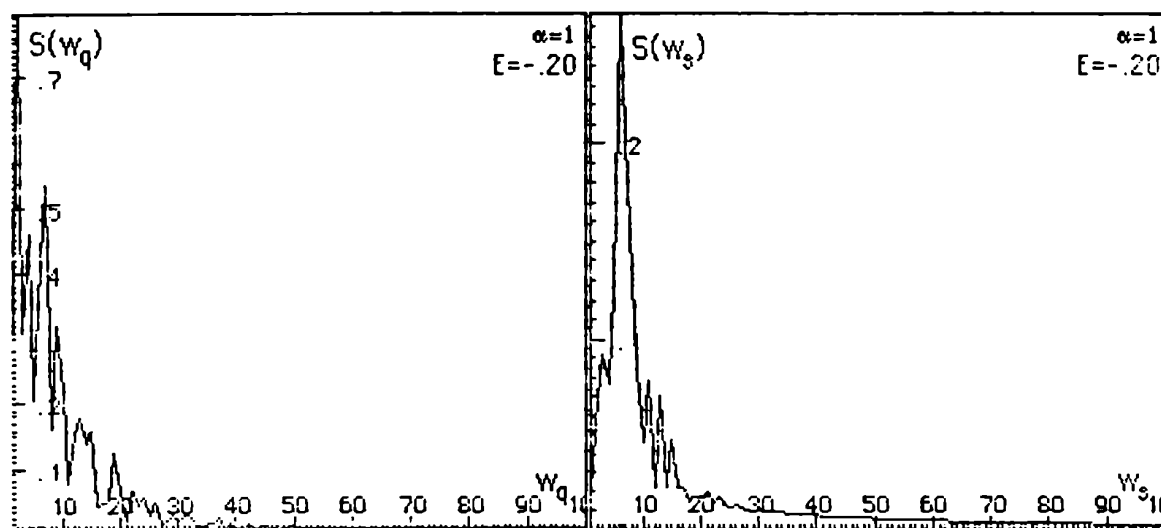
nética en valores similares a los de energías menores, pero aumenta notablemente la variación de la variable s



Los siguientes son cortes de Poincaré en el plano $s=0, P_s>0$, para distintas energías. Con esta visión queda más claramente ejemplificado lo expuesto anteriormente en la zona en torno a la loma ($E=0$)



Estos son espectros de Fourier típicos para una condición inicial dentro del pozo.



También se calcularon los coeficientes de Lyapunov donde se nota que aparecen situaciones caóticas para distintas condiciones iniciales. Los mismos aparecen en la siguiente tabla, comparándolos con el caso estocástico.

3. El oscilador de Duffing impulsado con una fuerza estocástica.

Para ver las diferencias que aparecen entre el tratamiento de Nosé con una descripción que combina las ecuaciones determinísticas con fuerzas de tipo estocásticas a las que sólo se las conoce por su estadística, se ha estudiado como reacciona el sistema de Duffing si es impulsado exteriormente por una sucesión de impulsos delta, en el caso en que se encuentra aislado y en el caso en que está en contacto con el reservorio térmico.

3.1. Sistema de Duffing impulsado con una fuerza aleatoria

Al sistema que proviene del Hamiltoniano:

$$H(x,p_x) = \frac{p_x^2}{2} - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4} \quad (3.3.1)$$

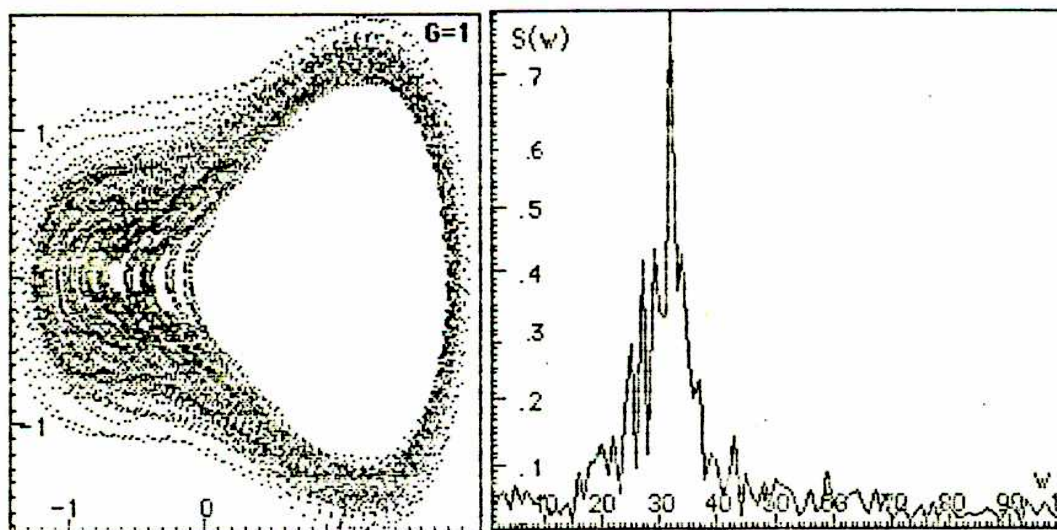
se lo excita con una fuerza externa generando el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= p_x \\ \dot{p}_x &= -x - x^3 + F_{ex} \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

donde la fuerza externa es una sucesión de impulsos de tipo delta, con amplitud variable aleatoriamente entre 0 y G, siendo G un parámetro del sistema, constante y positivo.

$$F_{ex} = G Rdm(t)\delta(t-t') \quad (3.3.3)$$

El sistema efectúa libraciones en torno a algunos de los puntos fijos, de acuerdo a las condiciones iniciales. Al ser introducida la fuerza externa, el sistema se desestabiliza, pero tiende a seguir la órbita no perturbada. Si la intensidad de la fuerza es pequeña, simplemente aparecerán algunos corrimientos de la órbita original. A medida que G crece, la órbita se hará más y más difusa pero permanecerá en torno al mismo punto de equilibrio. Esta es la diferencia fundamental con el sistema de Nosé, ya que este último posibilita que el sistema recorra todo el espacio de fases. Para $G = 1$, por ejemplo, las órbitas tienen características caóticas, siendo el coeficiente de Lyapunov positivo $\lambda_1 = 3.845 \times 10^{-2}$. La figura muestra el retrato en fase y su espectro de potencia correspondiente.



3.2 Sistema de Duffing-Nosé impulsado con una fuerza externa.

En este caso se ha trabajado con el sistema de Duffing-Nosé, agregando además una fuerza externa al oscilador del mismo tipo que en el caso anterior. Las ecuaciones que gobiernan el sistema son:

$$\begin{aligned}\dot{Q} &= \frac{P}{S}, \dot{P} = (-Q^3 + Q)S + F_{\text{ext}} \\ \dot{s} &= \frac{SP_z}{\alpha}, \dot{P}_z = \frac{P^2}{S^2} - 1\end{aligned}\quad (3.3.4)$$

siendo la fuerza externa del mismo tipo que la anterior (ecuación 3.3.3). El efecto que produce la aparición de una fuerza externa de tipo aleatorio en el comportamiento del sistema se traduce en una disminución general del caos, que se observa en los retratos de fase, en los espectros de potencia y en los coeficientes de Lyapunov. Estos últimos al ser calculados para la misma energía con o sin fuerza aleatoria y bajo idénticas condiciones iniciales, son menores cuando aparece la fuerza, e incluso zonas donde sin fuerza externa hay caos, se transforman en cuasiperiódicas. Contra lo que podría suponerse, la aparición de una variable aleatoria no complica el sistema sino que lo unifica llevándolo a un comportamiento más predecible: la velocidad de divergencia de las órbitas es también la velocidad de pérdida de información que se tiene sobre el sistema (CRUTCHFIELD, 1982). La siguiente gráfica muestra los retratos en fase para una energía inicial de $E = -0.248$, que si se compara con el caso sin fuerza se notará mayor regularidad en las órbitas. Incluso puede verse el fenómeno que la partícula rota en torno al punto fijo

inestable, aunque este comportamiento no es válido para energías mayores, en las cuales el sistema recorre todo el espacio de fases entrando y saliendo de los pozos.

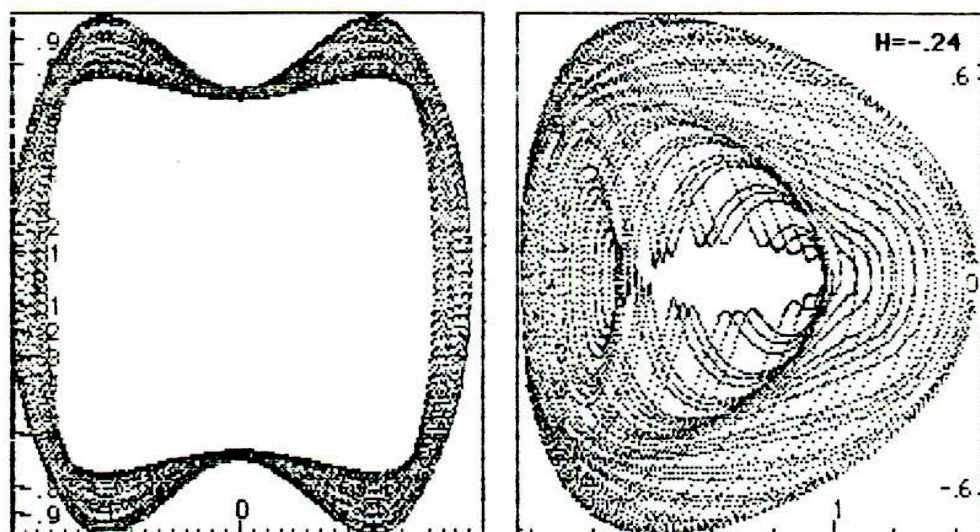


Tabla de coeficientes del primer coeficiente de Lyapunov entre el sistema con fuerza externa y el sistema sin fuerza externa:

Energía	Lambda 1	Lambda 1 (Rdm)
-248	3.15e-03	1.78e-03
-010	4.90e-03	3.6e-03
0.00	6.80e-03	4.57e-03
1.00	0.00e+00	0.00e+00
10.0	3.608e-03	-1.75e-03

4. *Vidas medias de la partícula dentro del pozo*

La variación del tiempo de vida media dentro del pozo es función de la energía y del parámetro de inercia del baño, alfa.

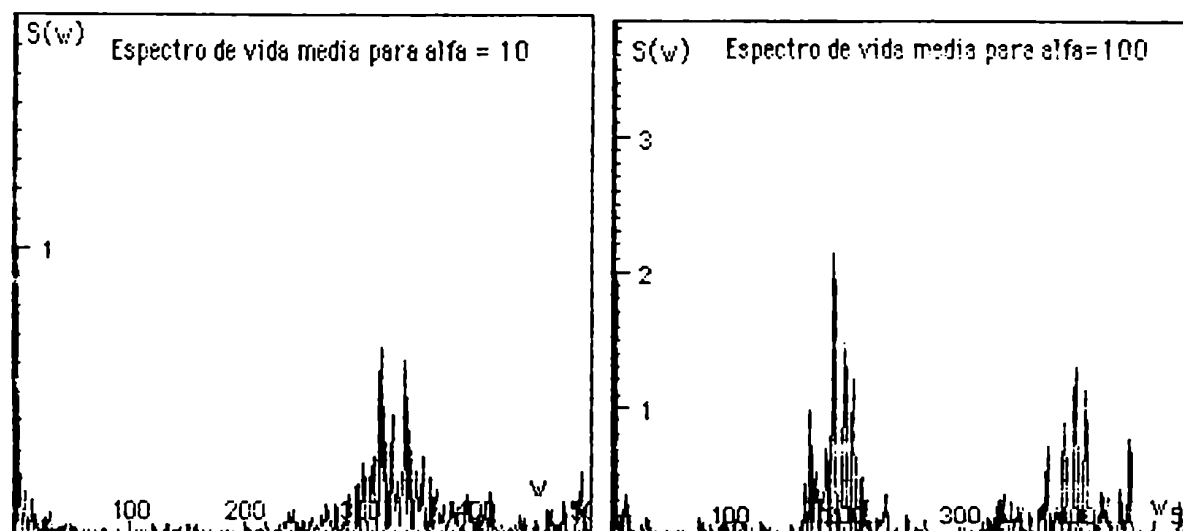
Se han calculado las vidas medias para distintas energías y para distintos alfa. los resultados obtenidos son los siguientes:

1) Variando alfa

En todos estos casos se trabajó con una energía total $E = -0.205$ y con las condiciones iniciales $q=1$, $s=1$ y $P_s = 0.0$ (es decir que inicialmente el sistema está dentro del pozo). Para alfa pequeños (del orden de 0.001 y hasta 0.01) el sistema sale del pozo de potencial gracias a la energía que le entrega el baño (la energía del baño inicialmente es de 0.25) y libra alrededor del punto fijo inestable ($x=0$) sin regresar al pozo, como se explicó anteriormente. Para alfas mayores el movimiento es una combinación de libraciones en torno a $x=0$ y libraciones en cada uno de los pozos. Para cada valor de alfa hay un tiempo típico de vida media dentro del pozo. Pero además, si la partícula no sale en ese tiempo, lo hace en el próximo período, así, como se puede observar en los espectros, existe una amplitud mayor que corresponde al promedio y amplitudes múltiplos de dicho período.

La estadística de la serie muestra además un cambio cualitativo en el comportamiento. Para alfas crecientes la dispersión de los datos crece, mientras que el valor medio se mantiene prácticamente constante. Las gráficas que siguen muestran los espectros de potencia de la serie tiempo de vida media, en los que se pueden observar la frecuencia típica y sus armónicas. Otras características estadísticas como el sesgo y la curtosis, muestran que en todos los casos tiene sesgo a la derecha

(positivo). La curtosis muestran picos que en general son más aplastados que la curva gaussiana (curtosis= 3). Estas características se muestran en las tablas correspondientes.



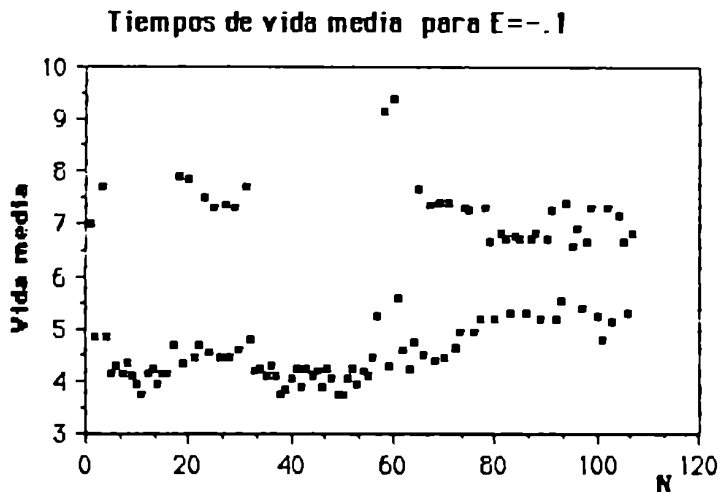
Las ultrabajas frecuencias corresponden a las órbitas fuera del pozo (el programa detecta cada cambio de signo de la coordenada x). Para $a=10$, el grupo de frecuencias que están entre 300 y 400, tiene dos picos mayores: en 318 y en 339, que corresponden a períodos de 3.18 y 2.94 respectivamente (cada serie tiene 1000 puntos), estos son los tiempos en que con mayor probabilidad la partícula permanece dentro del pozo.

Para $a = 100$ aparecen dos frecuencias típicas: alrededor de $w=200$ y en $w= 400$, que corresponden a períodos de 5 y 10. en este caso se nota que la partícula, permanece un período o su múltiplo. De la simple observación de la serie se puede detectar este comportamiento. El tratamiento estadístico, da valores promedios tomados para toda la serie que no describen muy bien la situación. De cualquier manera se detallan a continuación:

alfa	media	varianza	sesgo	curtosis
0.1	4.19	0.4	0.07	1.87
1.0	5.60	7.56	2.38	4.80
10.0	5.59	23.6	1.58	1.41
100.	5.30	55.4	3.31	10.4

2) Vidas medias variando la energía

En lo que sigue se trabajó variando la energía total del sistema con el parámetro $\alpha=1$, fijo.



La gráfica muestra los tiempos de vida media para una energía de $E=-.1$. Los puntos que aparecen entre 6.0 y 8.0 corresponden a libraciones de la partícula en torno a $x=0$ (fuera del pozo). Los otros (alrededor de 4.0) son tiempos dentro del pozo.

La siguiente tabla muestra la variación de los promedios de vidas medias dentro del pozo. Para energías cercanas a cero, la vida media es bastante menor que para energías menores. Dentro del pozo no hay mayores variaciones. También en este caso se nota un fenómeno de periodos típicos y sus armónicas en los tiempos de vidas medias, similar al presentado en el caso anterior

Energía	Media	Varianza	Sesgo	Curtosis
-01	4.86	5.52	3,17	9.89
-02	5.04	5.80	3.04	9.32
-04	5.68	6.01	2.27	4.25
-05	5.63	7.83	2.46	5.85
-08	5.74	8.58	2.37	5.01
-10	5.55	7.35	2.38	4.47
-12	5.48	6.57	2.35	6.57
-15	5.39	6.41	2.52	6.41
-18	5.42	6.99	2.66	6.99
-20	5.60	7.56	2.38	4.87

En las proximidades de $E=0$, los tiempos de vida media en el pozo son menores (hay mayor probabilidad de escape) y la estadística nos muestra una curva con mayor varianza, (más desparramada), lo que se nota también en el aumento de la curtosis (momento de cuarto orden). Para energías menores, no se aprecia gran variación entre los momentos estadísticos.

Conclusión

Un sistema como el oscilador de Duffing, cuya ruta al caos es por bifurcación de período (HAKEN, 1983) al estar en contacto con un reservorio térmico como el presentado cambia su ruta al caos por la de cuasiperiodicidad.

Si se piensa en un Hamiltoniano con el potencial (3.2.1) puede escribirse en variables ángulo-acción usando una serie de infinitas variables angulares (ECHANIZ, 1989), la interacción de estos modos de

oscilación con los del baño, tiene alta probabilidad de producir por lo menos tres frecuencias cuyas número de armónica no sean múltiplos entre sí y el sistema se desestabilice. (es de notar que de los infinitos términos en variables angulares que aparecen en el desarrollo de Fourier, sólo los dos primeros términos son de relevancia, ya que por ejemplo, el tercero es unas 500 veces más pequeño que el anterior).

Por otra parte, cuando se adiciona ruido externo al sistema, éste se comporta de manera más regular, disminuyendo el valor de los coeficientes de Lyapunov. Probablemente el ruido externo compita con el desorden provocado por la inclusión de un baño térmico, lo que en definitiva reduce el nivel de caos total. Resultados análogos se han comprobado en el análisis de series naturales (ROMANELLI, 1985).

5. La Red de Toda

El último de los casos de sistemas hamiltonianos no lineales que se tratará en este capítulo es la red de Toda.

Consiste en tres partículas en interacción entre sí, de manera cerrada (todas interactúan con sus dos vecinas), con un potencial de tipo repulsivo, que depende exponencialmente de las distancias angulares que hay entre ellas. Su Hamiltoniano es:

$$H = \frac{P_1^2}{2} + \frac{P_2^2}{2} + \frac{P_3^2}{2} + e^{-(\phi_1 - \phi_2)} + e^{-(\phi_2 - \phi_1)} + e^{-(\phi_2 - \phi_3)} - 3 \quad (3.5.1)$$

Usando la conservación del impulso angular puede llevarse a un sistema bidimensional que tiene la forma:

$$H = \frac{P_x^2}{2} + \frac{P_y^2}{2} + \frac{1}{24} (e^{(2y + \sqrt{3}x)} + e^{(2y - \sqrt{3}x)\phi_1} + e^{-4y}) - \frac{1}{8} \quad (3.5.2)$$

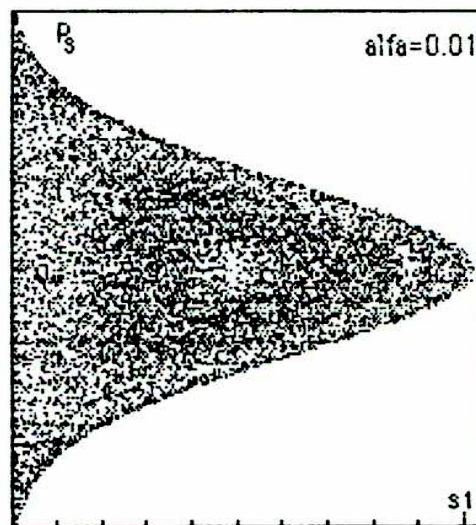
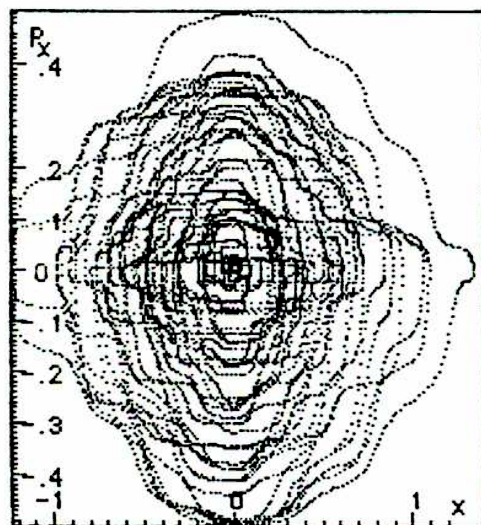
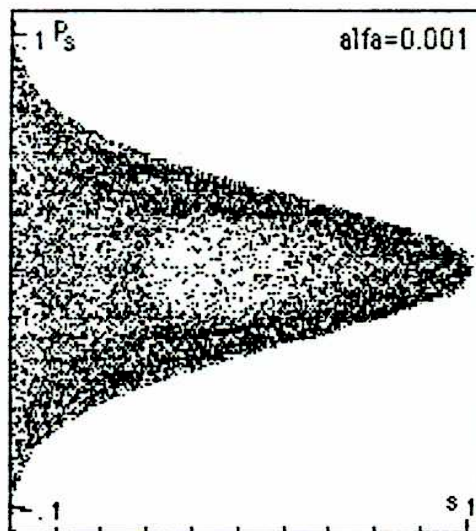
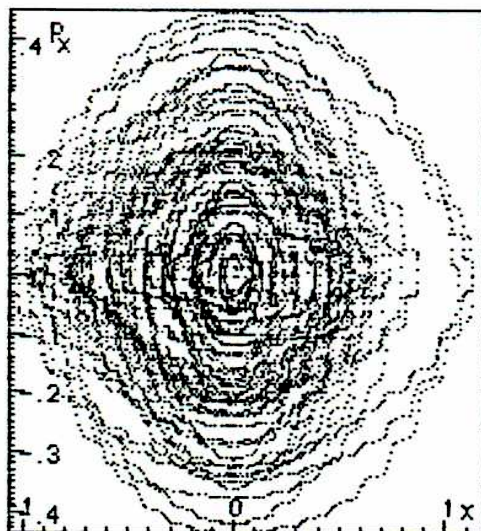
Este sistema es integrable, por lo tanto tendrá órbitas definidas, y no existirá posibilidad de paso a la ergodicidad, para ningún valor de los parámetros.

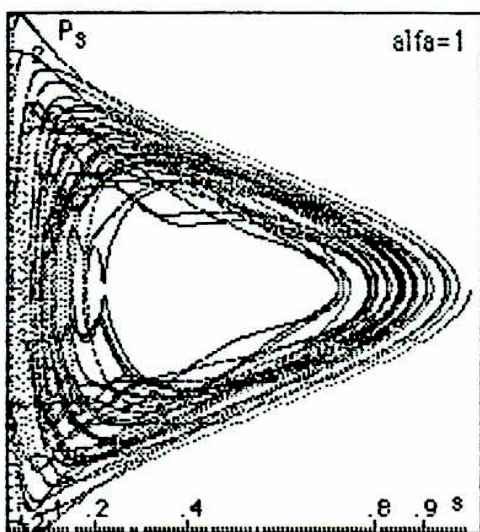
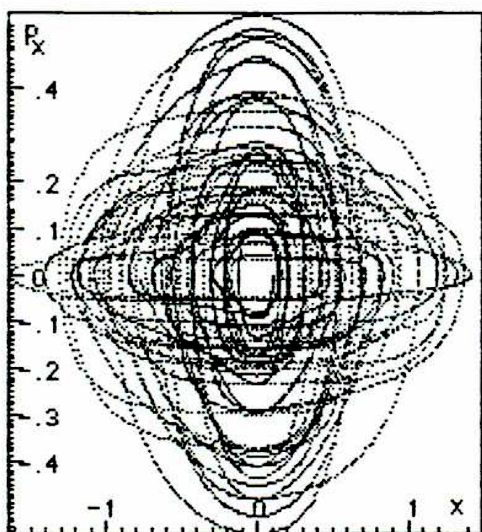
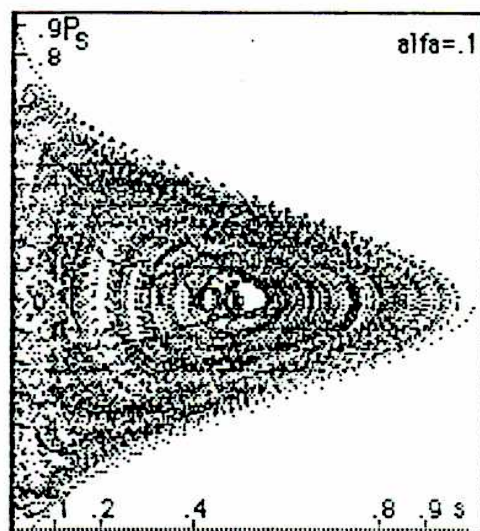
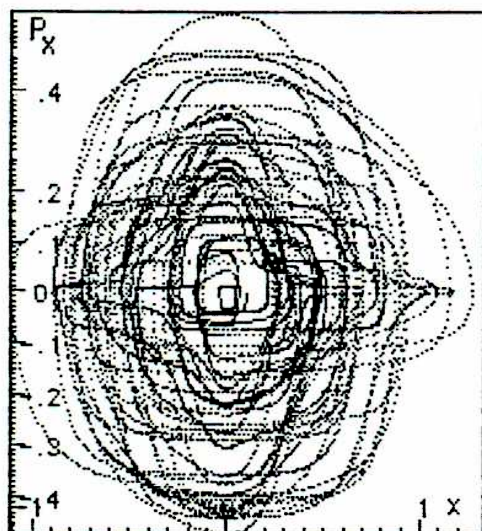
La red de Toda constituye un extraño caso de sistema no lineal, integrable, bidimensional. Al ponerlo en contacto con el baño térmico se pierde la condición de integrabilidad, apareciendo intercambios de energía entre sistema y baño. El Hamiltoniano en estudio es entonces:

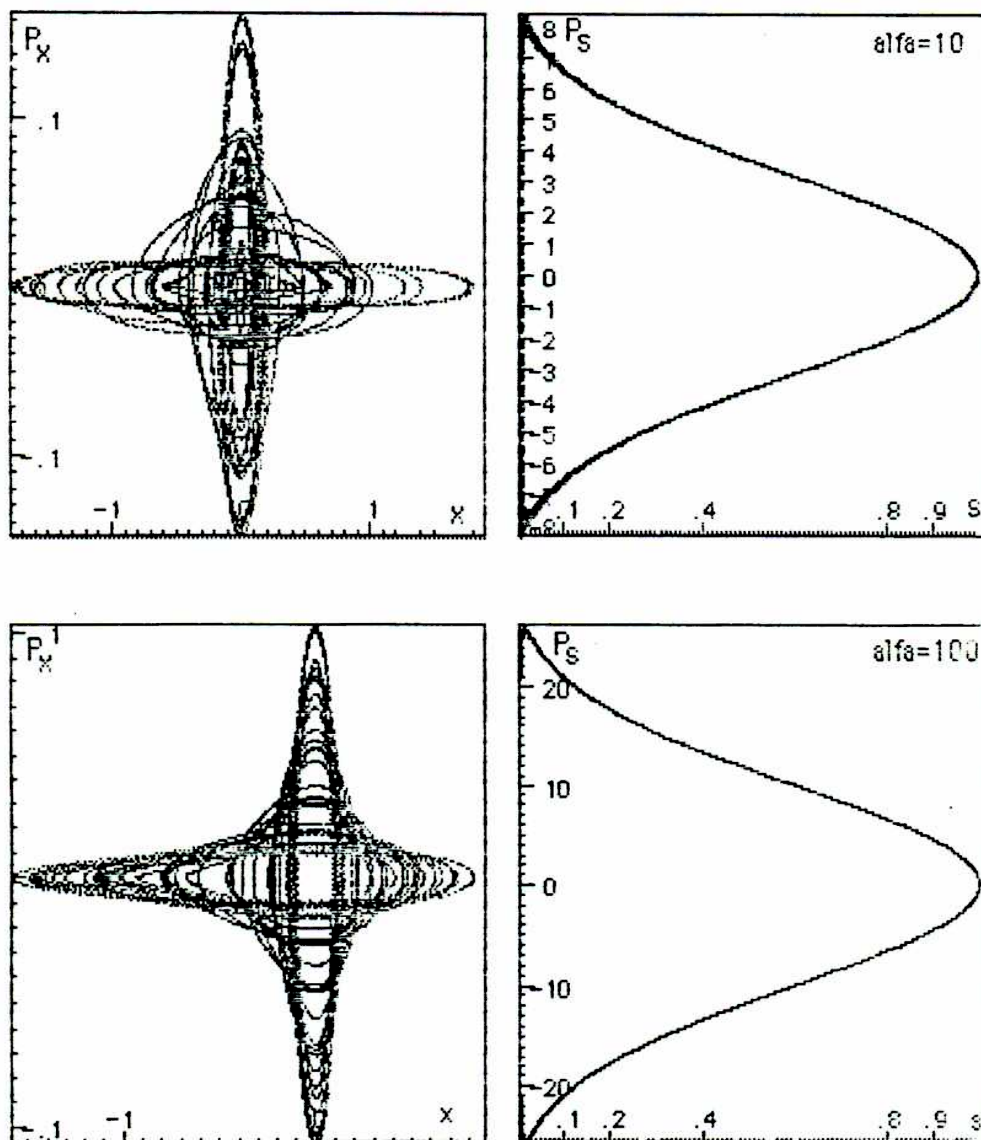
$$H = \frac{P_x^2}{2s^2} + \frac{P_y^2}{2s^2} + \frac{P_s^2}{2\alpha} + \frac{1}{24} (e^{(2y+\sqrt{3}x)} + e^{(2y-\sqrt{3}x)\phi_1} + e^{-4y}) - \frac{1}{8} + 2k_B T_{eq} \ln s$$

Los siguientes son retratos en fase para distintos valores de alfa e iguales condiciones iniciales, siendo estas: $x=0.1$, $y=0.1$, $P_x=0$, $P_y=0$, $s=1$, $P_s=0$.

Nuevamente se grafican en paralelo, pero en este caso como el sistema es de 6 dimensiones, se graficará el plano (x, P_x) y el (s, P_s) .







Para las situaciones anteriores, se calcularon los espectros de potencia verificándose la presencia de cuasiperiodicidades que conducen al caos, lo que se confirma con el cálculo de los coeficientes de Lyapunov. Con este último caso, se verifica que tal como los anteriores la ruta al caos es dada por el escenario de Ruelle-Newhouse-Takens, lo que parecería una condición típica de los sistemas de Nosé.

Por otra parte, cabe señalar que, aún en casos en que el baño se torna periódico, como para $a \gg 1$, el sistema de Toda sigue siendo caótico. En este

aspecto conviene señalar que el cálculo de los coeficientes de Lyapunov, sólo da una componente positiva, ya que el resto del espectro tiene componentes negativos o cero.

La red de Toda, puede ser escrita en variables de ángulo-acción, usando para ello una base de funciones de Bessel (HERNANDO, 1988). De la misma forma que en el caso del oscilador de Duffing, aparecerán múltiples modos de oscilación, la interacción de estos modos de oscilación con los del baño (aunque éste sea periódico), tiene alta probabilidad de producir por lo menos tres frecuencias cuyas número de armónica no sean múltiplos entre sí y el sistema se desestabilice.

A continuación se detallan los coeficientes máximos de Lyapunov hallados para las situaciones anteriormente descritas:

alfa	lamda 1
1.e-03	3.26e-02
1.e-02	3.56e-02
1.e-01	2.97e-02
1.	1.5e-02
10.	1.25e-02
100.	1.45e-02

Conclusión:

El oscilador de Toda analizado con sistema extendido de Nosé, constituye un sistema de seis grados de libertad. Las dos principales características son: para muchos parámetros el sistema entra en caos y la ruta al caos es a través de

cuasiperiodicidades de la misma forma que los casos anteriores. Con respecto a lo primero, es análogo a lo descrito por Grebogi et al (GREBOGI, 1984) que indica que los atractores caóticos son bastante raros para tres grados de libertad, si la no linealidad es moderada, pero son bastante comunes para cuatro grados de libertad. En este caso ocurre algo similar, a pesar que estamos trabajando con el sistema total que es conservativo, aunque el sistema de Toda deje de serlo, por entra en contacto con el exterior. Parecería que sistemas de muchos grados de libertad tengan mayor tendencia a entrar en caos que sistemas de baja dimensionalidad, sobre todo cuando se trata que la ruta al caos es por cuasiperiodicidades. Un sistema más complejo tiene sin duda una descripción que en términos de componentes angulares tiene mayor número de términos significativos, por lo que aumenta la probabilidad de aparición de frecuencias que desestabilicen el sistema. Esto último se conjuga con la ruta al caos, que en los tres casos es la misma, y es la de cuasiperiodicidad.

Capítulo 4

Sistemas disipativos

En este capítulo se dará un método para escribir la función Lagrangiana de un sistema disipativo. El método se basa en un artificio matemático que consiste en generar un sistema imagen del sistema real, que reacciona de manera contraria al sistema físico, es decir que recibe toda la energía que éste disipa.

A partir de este Lagrangiano se calcula el correspondiente sistema extendido según el método de Nosé, primero de la misma forma que la formulación original, y luego ampliando el sistema de Nosé en dos grados de libertad.

En todo este capítulo se considera a la masa igual a la unidad.

1. El método de imágenes

Supongamos que se desea escribir un sistema Lagrangiano, cuyas ecuaciones son del tipo:

$$\ddot{x} - R\dot{x} + kx = 0 \quad (4.1.1)$$

se propone el siguiente truco: ampliar el espacio de fases al doble del original, creando un sistema imagen en x^* y \dot{x}^* , de manera de lograr una función Lagrangiana, cuyas correspondientes ecuaciones sean las deseadas, como por

ejemplo (4.1.1) (MORSE, 1953). Para el caso anterior, simplemente $L(x, \dot{x}, x, \dot{x})$, será:

$$L(x, \dot{x}, x, \dot{x}) = m\dot{x}\dot{x} + \frac{R}{2}(\dot{x}\dot{x} - x\dot{x}) - kx\dot{x} \quad (4.1.2)$$

Observemos que al aplicar las ecuaciones de Lagrange, derivando $L(x, \dot{x}, x, \dot{x})$ por \dot{x} y x , resulta (4.1.1). Si se deriva $L(x, \dot{x}, x, \dot{x})$ con respecto al par (x, \dot{x}) , ocurre que se tiene una ecuación en (\dot{x}, x) tal que:

$$\dot{x} + R\dot{x} + kx = 0 \quad (4.1.3)$$

¿que significa esto?. Simplemente se crea en conjunto un sistema que disipa y un sistema que recibe la energía que el otro libera (por supuesto este sistema es artificial). El sistema ampliado total es conservativo y tiene el doble de dimensiones que el anterior. Por otra parte se supone que el mecanismo por el que se pierde energía es igual con el que el otro recibe la energía. Por supuesto es un artificio matemático para lograr escribir (4.1.2).

Generalización

A partir del truco propuesto, se generalizó para un potencial $V(x)$ que sea una función polinómica de x y para una disipación del tipo $Rx\dot{x}^n$, con n cualquier entero.

En este caso, la ecuación de movimiento es:

$$\ddot{x} - R \dot{x} x^n \rightarrow \frac{\partial V}{\partial x} = 0 \quad (4.1.4)$$

donde:

$$V(x) = \sum_{i=1}^m \alpha_i x_i \quad (4.1.5)$$

siendo los α_i constantes

Para que aparezca el término disipativo, la idea es colocar un término del tipo:

$$G(x, \dot{x}, \ddot{x}) = \frac{R}{2} (\dot{x} \ddot{x} - \frac{\ddot{x} \dot{x}^2}{n+1}) x^n \quad (4.1.6)$$

y para el potencial:

$$V(x, \dot{x}) = \dot{x} \sum_{i=1}^m \alpha_i x^i \quad (4.1.7)$$

finalmente el Lagrangiano será:

$$L(x, \dot{x}, \ddot{x}) = m \dot{x} x^n + \frac{R}{2} (\dot{x} \ddot{x} - \frac{\ddot{x} \dot{x}^2}{n+1}) x^n - \dot{x} \sum_{i=1}^m \alpha_i x^i \quad (4.1.8)$$

Si se aplican las ecuaciones de Lagrange, derivando con respecto a \ddot{x} y \dot{x} al sistema anterior se obtiene la ecuación deseada. Si se deriva con respecto a x y \dot{x} se obtiene

$$\ddot{x} + \frac{R n \dot{x} x^{n-1}}{2} - \dot{x} \sum_{i=1}^m \alpha_i x^{i-1} = 0 \quad (4.1.9)$$

que únicamente se desacopla para $n=1$ y $m=2$, que corresponde al caso anterior.

Sin embargo, a los fines deseados, no importa demasiado el aspecto de la ecuación en (x^*, \dot{x}^*) ya que sólo se la usa para generar un sistema que tiene una ecuación disipativa como (4.1.4) y se desea escribir un Hamiltoniano para poder aplicar el formalismo de Nosé.

2. El sistema extendido

Usando que:

$$H(q,p) = \sum_{i=1}^N q_i p_i - L(p,q)$$

$$P_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (4.2.1)$$

se puede escribir la ecuación del Hamiltoniano, y con el formalismo de Nosé, para una disipación que es una función lineal de la velocidad ($n=1$), se obtiene que:

$$H = \frac{P_x P_x}{s^2} + \frac{P_z^2}{2\alpha} + \frac{R}{s} (x^* P_x - x P_x) + V(x, x^*) + \ln s \quad (4.2.2)$$

El primer término corresponde a la energía cinética del sistema, el segundo a la del reservorio térmico. El segundo término es el de la disipación y luego vienen los términos de energía potencial.

Las ecuaciones correspondientes son:

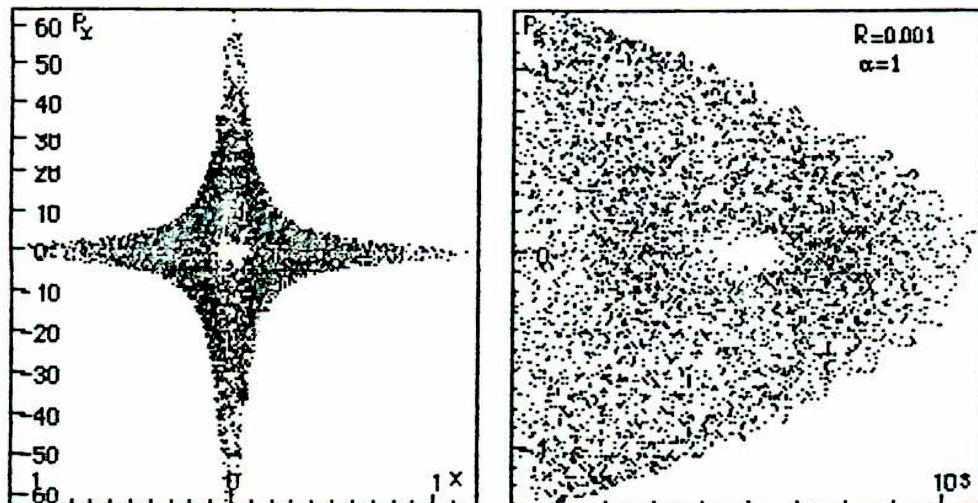
$$\begin{aligned}
\dot{x} &= \frac{P_x^*}{s^2} - \frac{R_x}{s} \\
\dot{P}_x &= \frac{R_x}{s} P_x - \nabla_x V(x, x^*) \\
\dot{x}^* &= \frac{P_x}{s^2} + \frac{P_x^*}{s} x^* \\
\dot{x} &= \frac{P_x^*}{s^2} - \frac{R_x}{s} \\
\dot{P}_x &= -\frac{R_x}{s} P_x^* - \nabla_x^* V(x, x^*) \\
\dot{s} &= \frac{P_s}{\alpha} \\
\dot{P}_s &= \frac{2P_x P_x^*}{s^2} + \frac{R_x}{s^2} (x^* P_x^* - x P_x) - \frac{1}{s}
\end{aligned} \tag{4.2.3}$$

Estas ecuaciones pueden integrarse numéricamente. Por supuesto, sólo tiene sentido físico (x, P_x) y (s, P_s) , ya que el sistema estrellado es una simulación matemática usada para poder utilizar el formalismo. Es de notar, que en la medida que el sistema real disipa energía el otro sistema aumenta su energía. (La relación no es directa, ya que interactuando con ambos sistemas está el baño térmico).

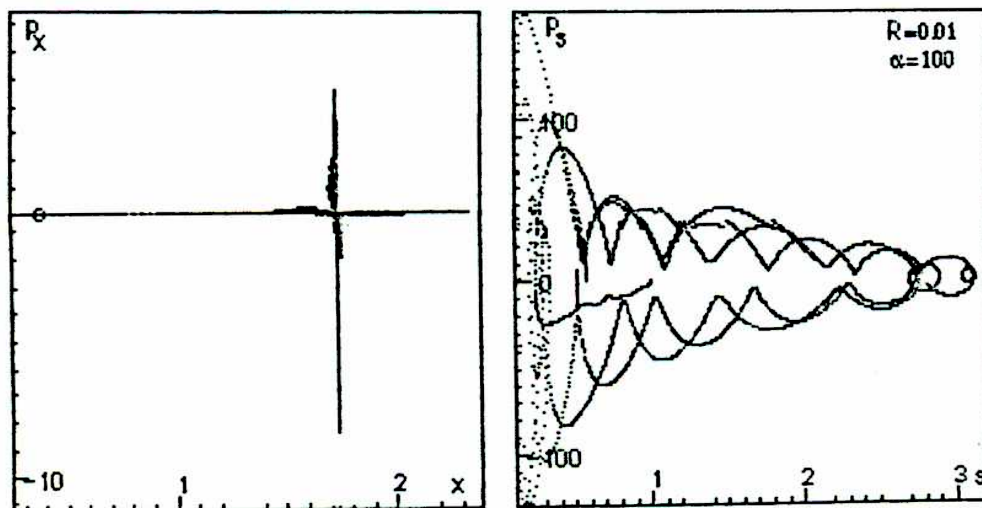
La aplicación se ha hecho con un oscilador armónico y con un sistema de Duffing disipativos, cuyos potenciales ya fueron estudiados en el capítulo anterior. En ambos casos ocurre que el sistema cae en puntos inestables de gran energía cinética y con un leve apartamiento (rotación) alrededor de la coordenada x (vórtices). Variando los parámetros como la masa inercial y el coeficiente de disipación R , solo se altera la duración del transitorio, y finalmente el sistema es atraído hacia el estado descripto. El baño oscila, con un comportamiento similar a los casos conservativos anteriormente tratados.

Estas características pueden observarse en las figuras siguientes, en las dos primeras se ha graficado el oscilador armónico disipativo, junto con el baño térmico y en las otras dos el oscilador de Duffing, con su reservorio térmico.

Siempre las figuras del sistema estan a la izquierda, mientras que las del reservorio térmico a la derecha.



Este primer retrato de fase corresponde al oscilador armónico disipativo. Muestra como el sistema va hacia un punto fijo. El baño térmico destruye sus órbitas, cubriendo el espacio de fases.



Este último par de retratos corresponden al oscilador Duffing disipativo, donde se ve el mismo comportamiento, aunque en el baño aparecen cuasiperiodicidades

3. Ampliación del sistema de Nosé

Se decidió ampliar el sistema de Nosé agregándole un grado más de libertad, al baño térmico. Es decir, así como se propuso un sistema extendido a través de introducir una variable s que multiplica a las velocidades del sistema real, se introduce una variable s^* que multiplica a las velocidades del sistema artificial. Por lo tanto:

$$\begin{aligned} v &= s\dot{x} \\ v^* &= s^*\dot{x}^* \end{aligned} \quad (4.3.1)$$

y, el correspondiente Hamiltoniano:

$$H = \frac{P_x P_x^*}{ss^*} + \frac{P_z^2}{2\alpha_1} + \frac{P_z^{*2}}{2\alpha_2} + E_x \left(\frac{y^* P_x^*}{s^*} - \frac{x P_x}{s} \right) + V(x, x^*) + \ln s + \ln s^* \quad (4.3.2)$$

A partir de (4.3.1) pueden hallarse las ecuaciones de movimiento del sistema. Integrándolas se obtiene: para el caso del oscilador armónico disipativo, aparecen cuasiperiodicidades en el sistema y para el caso del oscilador de Duffing el sistema tiende a un punto fijo, esta vez sí, punto de equilibrio.

Conclusión

A pesar de haber ampliado el número de grados de libertad del reservorio térmico, no parece posible poderse describir de manera unívoca el comportamiento de sistemas disipativos en contacto con baños externos a través de un formalismo tan simple como el presentado.

La especulación es que no es posible evadirse tan fácilmente de la jerarquía de tiempos de relajación que aparecen en las teorías cinéticas más rigurosas (BALESCU, 1975), y que es a través de ellas la descripción correcta de como decae el sistema.

El formalismo de Nosé, sólo puede describir situaciones más sencillas, como son las conservativas, y para ellas ha tenido buenos resultados.

Conclusiones

El sistema extendido de Nosé introduce un grado de libertad adicional s , el cual actúa como un sistema externo para el sistema físico de N partículas. Eligiendo una adecuada función potencial para la variable s , la función de partición del sistema extendido (partícula más variable s) coincide con la del ensamble canónico, y por lo tanto, los valores medios de las variables son iguales en ambos formalismos.

El desarrollo de esta tesis se hace analizando distintos sistemas a partir de dicho formalismo, usando para ello las ecuaciones de movimiento provenientes del Hamiltoniano por simplicidad de cálculo. Por supuesto, estas ecuaciones son determinísticas y reversibles temporalmente en oposición a otro tipo de formalismos que incluyen funciones estocásticas para describir sistemas que interactúan con el exterior.

La primera conclusión que podemos extraer, se refiere al tipo de sistema: carece de puntos fijos (o de equilibrio), lo que implica que la ruta al caos no proviene por desestabilización de los puntos de equilibrio, sino que sugiere una ruta al caos global. Esto es válido para cualquier sistema con que se trabaje (incluyendo sistemas disipativos ampliados).

La segunda conclusión es que para los sistemas sin disipación con los que se trabajó aparece una suerte de universalidad en la ruta a al caos, que es la de Ruelle-Newhouse-Takens (o por cuasiperiodicidad). Esto incluye el caso de oscilador de Duffing que aislado o simplemente excitado con una fuerza externa tiene una ruta al caos por bifurcación de período. Esto sugiere que todos los sistemas tratados con este formalismo tienen la misma ruta al caos.

Por otra parte se confirman ciertas evidencias que se habrían tenido en el análisis de series naturales, sobre el efecto de términos externos aleatorios; con respecto a que dicho tipo de fuerzas regularizan al sistema disminuyendo los exponentes de Lyapunov.

Sin embargo los sistemas disipativos, no tiene buena reacción con este formalismo. A pesar de ampliar el número de grados de libertad en dos (uno para el sistema real y otro para el especular) no parecería poderse describir de manera unívoca la dinámica disipativa a temperatura constante, en el marco de la teoría ampliada de Nosé. La especulación que podemos hacer es que no es posible evadir la jerarquía de tiempos de relajación que aparecen en las teorías cinéticas más rigurosas.

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'Julia...' followed by a flourish.A handwritten signature in black ink, appearing to be 'W. G. S.' followed by a horizontal line.

Referencias

- Abraham, F. F., Koch, S. W. y Desai, R. C. . Phys. Rev. Lett., **72**, 2384, (1980)
- Andersen, H. C., J. Chem. Phys., **72**, 2384, 1980
- Caldeira, A. O. y Leggett A. J.: Annals Of Phys. **149**, 374-456, 1983
- Echaniz, G.: Trabajo de Seminario: *Quasiperiodicidades y Caos en el modelo de Fermi-Pasta-Ulam*, 1989
- Eckmann, J. P. y D. Ruelle :Rev. Mod. Phys. **57** , 617, 1983.
- Feigenbaum, M. J.: Los Alamos Sci. **1**, 4 ; Comm. Math. Phys. **77**, 65.
- Feigenbaum, M. J.: Phys. Lett A **74** ,375, ; J. Stat. Phys. **21**, 669, 1979.
- Figliola M.A. y L. Romanelli: Geoacta **15**, (1), 391, 1988.
- González, D.L.: "*Sincronización y Caos en Osciladores no lineales*" Tesis Doctoral UNLP 1987
- Grassberger P. y I Procaccia, Phys. Rev. **A28** , 2591,1983.
- Guckenheimer, J. y Holmes, P.: *Nonlinear oscillators, Dynamical systems and Bifurcations of vector fields*, Springer - Verlag, N. Y., 1984
- Haken, : Advanced Synergetics
- Heron, M.: Comm. Math. Phys., **81**, 229, 1976
- Hoover, W.G., Phys. Rev. **A31** , 1695, 1985
- Lorenz, E. N. : J. Atmosph. Scies. **20**, 130, 1963.
- Morse, P. M. and Feshbach, H. "*Methods of Theoretical Physics*"
Mc Graw-Hill Book Company, L.T.D.
- Munakata, T. y Bosse, J.: Dyn. Disor. Materials Srpringer Proceeding in Phys. **37**,
155 (1989)
- Newhouse, S., D. Ruelle y F. Takens : Comm. Math. Phys., **64**, 35, 1978

Nosé, S.: Mol. Phys., **52**, Nº 2, 255-268, 1984

Nosé, S.: J. Chem. Phys., **81** (1), 1984

Parrinello, M. y Rahman, A. Phys. Rev. Lett., **45**, 1196 (1980)

Posch H. A., Hoover, W.G. y Vesely, F. Phys. Rev. **A33** Nº6 , 4253, 1986

Pomeau Y., J. C. Roux, A. Ross, S. Bachelar y C. Vidal: J. Phys. Lett. **42**, L515, 1981

Romanelli, L., Figliola, M.A., Hirsch, F. y Radicella, S.: Solar Phys., **110**, 391-395,
1987

Romanelli, L.: Tesis Doctoral: *Dependencia de la Excitación en osciladores de relajación*, 1989

Takens, F.: *Dynamical Systems and Turbulence*, vol **898** de "Lectures Notes in Mathematics" ed. D. A. Rand y L. S Young (Springer, Berlin) p. 366, 1981.

Woodcock, L. Chem. Phys. Lett., **10**, 257, 1971

Agradecimientos

Muchas personas son las que tiene que ver, de manera directa o indirecta con el desarrollo de un trabajo. Pero a una lista acotada, de aquellos a quienes quisiera agradecerle, pertenecen:

Jorge Hernando, mi director, por su apoyo a realizar esta tesis y por tratar de inculcarme su rigurosidad para el trabajo.

Todo el personal de CAERCEM por tantos años de apoyo y compañerismo, en especial, Susana Díaz, María Marta Shultze, Laura Frulla y Esteban Reisin.

A Diego González, por todas sus ideas y su entusiasmo, las que pudo contagiarme en el breve tiempo que trabajamos juntos.

Mis familiares y amigos, en especial mi madre, Alejandro y mis hijos: Bianca y Guido, a quienes tantas horas le resté, para realizar este trabajo.

Finalmente, y con todo mi afecto y sinceridad, a Lilia Romanelli (Lili), ya que gracias a su entusiasmo y su apoyo, logré (un poco a los empujones) llegar a esta instancia deseada.