



DOBLE GRADO EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

CAOS EN SISTEMAS HAMILTONIANOS

TRABAJO FIN DE GRADO

Miguel Ibáñez García

Tutor: José Manuel Romero Enrique (FAMN)

JUNIO DE 2021

Caos en sistemas hamiltonianos

(Chaos in hamiltonian systems)

Miguel Ibáñez García

Resumen

En el presente trabajo estudiaremos numéricamente la dinámica del modelo propuesto por Hénon y Heiles en [14]: un sistema conservativo que puede entenderse como la perturbación de un oscilador armónico bidimensional. Dicha dinámica presenta caos para valores elevados de la energía del sistema, por lo que será imprescindible utilizar un integrador numérico que respete las principales cualidades del espacio fásico para resolver las correspondientes ecuaciones de movimiento.

Para ello, en primer lugar introduciremos los conceptos sobre Mecánica y Teoría del caos que necesitaremos para desarrollar nuestro trabajo. Posteriormente, abordaremos la construcción de los integradores numéricos adecuados, así como la elección de indicadores cuantitativos del caos robustos y eficientes. Finalmente, mostraremos y discutiremos los resultados obtenidos tras la simulación por ordenador.

Abstract

In the present work we will study numerically the dynamics of the Hénon-Heiles model, originally introduced in [14]: it is a conservative system which can be understood as a perturbation of a bidimensional harmonic oscillator. The aforementioned dynamics presents chaos when the energy is high enough, so it is completely necessary to use a numerical integrator that respects the main properties of phase space in order to solve the corresponding equations of motion.

To do so, firstly we will introduce the fundamental concepts of Mechanics and Chaos Theory we need to develop our research. Secondly, we will tackle the construction of appropriate numerical integrators, as well as the election of robust and efficient chaotic numerical indices. And finally, we will show and discuss the results obtained after computer simulations.

El aire se abre paso por doquier,
el agua atraviesa todo.

LIEH-TZU, *El emperador amarillo*

Un viejo estanque.
Se zambuye una rana:
ruido del agua.

MATSUO BASHOO

El caos es orden aún por descifrar.
JOSÉ SARAMAGO, *El hombre duplicado*

Agradecimientos

Gran parte del resultado de este trabajo es fruto de la labor de todos aquellos docentes que me han transmitido sus conocimientos a lo largo de toda mi etapa educativa, a los que agradezco de corazón todo su esfuerzo y su tan dedicada labor.

En particular, me gustaría agradecer a mi tutor José Manuel Romero su inestimable apoyo durante este duro y difícil año de trabajo. Ha sido un auténtico placer trabajar con él en este tema tan apasionante, y ha sabido perfectamente cómo reconducirme en aquellos momentos en que más perdido me encontraba. Tampoco quiero olvidarme de Antonio Córdoba, aquel profesor con el que di mis primeros pasos en el mundo del caos, y que he tenido muy presente mientras escribía estas páginas. Y por último, me gustaría agradecer a mi profesor de la ESO, José Luis García, toda su labor en conjunto, que tengo presente día tras día. Es y siempre será uno de mis mayores referentes.

En segundo lugar, también quiero agradecer a mis compañeros de universidad el haberme brindado tantas experiencias inolvidables. Como buen ejemplo del caos, nunca pensé que el hecho de que nuestros caminos se toparan hace cinco años pudiera producir un cambio tan radical en mi forma de entender la vida. En especial, quisiera agradecer a mi fiel compañero Antonio el tan valioso tiempo empleado al participar, aunque sea discretamente, en la realización de este trabajo, tanto por ayudarme a expresar mis ideas más confusas como por escuchar con esmero y paciencia mis tan frecuentes y aburridas divagaciones.

Por último, quisiera agradecer el apoyo, en muchas ocasiones invisible pero sin duda imprescindible, de mis padres y mis hermanos a lo largo de estos cinco años de carrera universitaria. Este trabajo está especialmente dedicado a mi padre y a Carlos, que siempre han estado dispuestos a debatir sobre las importantes consecuencias que trae aplicar el caos a diversos aspectos de nuestra vida. Sin prejuicios, sin dogmatismos y con la mente bien abierta a todo tipo de interpretaciones.

Índice general

1. Fundamento teórico	1
1.1. Mecánica hamiltoniana. Sistemas integrables	1
1.1.1. Espacio fásico y hamiltoniana de un sistema. Integrales primeras	1
1.1.2. Transformaciones canónicas	4
1.1.3. Sistemas integrables	8
1.2. Caos en sistemas hamiltonianos	12
1.2.1. Nociones de caos en sistemas dinámicos	12
1.2.2. ¿Qué entenderemos por caos hamiltoniano?	14
1.2.3. Secciones de Poincaré	16
1.2.4. El Teorema Kolmogorov-Arnold-Moser	17
1.2.5. El destino de los toros resonantes	21
1.3. Modelo de Hénon-Heiles	22
2. Metodología	25
2.1. Integradores simplécticos	25
2.1.1. Introducción	25
2.1.2. Esquemas de Runge-Kutta simplécticos	27
2.2. Indicadores numéricos del caos	30
2.2.1. Exponentes de Lyapunov	31
2.2.2. <i>Smallest Alignment Index</i> (SALI)	34

3. Resultados	37
3.1. Procedimiento experimental	37
3.2. Resultados y discusión	39
3.2.1. Análisis de la dinámica	39
3.2.2. Secciones de Poincaré	50
3.2.3. Mapa de condiciones iniciales	59
Conclusiones	62
Bibliografía	65
Anexo I: Algoritmo de Verlet para sistemas hamiltonianos	68
Anexo II: Código MATLAB empleado	70

Índice de figuras

1.1. Trayectorias en un toro bidimensional. Arriba, vista tridimensional de dichas trayectorias para (a) frecuencias conmensurables, (b) frecuencias inconmensurables. Abajo, vista de las mismas trayectorias en la representación modular típica. Tomada de [7]	11
1.2. SECs del oscilador armónico monodimensional de frecuencia $\omega = 2$ para energías $E \in \{1, \dots, 6\}$ (equivalentemente, $I \in \{1/2, 1, 3/2, \dots, 3\}$)	12
1.3. Sección de Poincaré de una trayectoria genérica, eligiendo como subvariedad base un hiperplano. Tomada de [7]	17
1.4. Una familia de toros habitando en la SEC de dimensión 3. Tomado de [29]	20
1.5. Líneas equipotenciales del potencial de Hénon-Heiles para $E = 1/1000, 1/100, 1/24, 1/12, 1/8, 1/6$	24
3.1. Secciones XY de las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales mostradas en la tabla 3.1. Los resultados han sido obtenidos mediante integración simpléctica. Para las figuras (d) y (e) hemos realizado $2,5 \cdot 10^4$ iteraciones	40
3.2. Representación tridimensional de las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales mostradas en la tabla 3.1, resueltas mediante integración simpléctica. El color indica la componente p_x correspondiente a cada punto	41
3.3. Secciones XY de las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales mostradas en la tabla 3.1, resueltas mediante un algoritmo RK de cuarto orden y paso temporal $k = 0,01$, para 10^6 iteraciones. Para las figuras (d) y (e) hemos realizado $2,5 \cdot 10^4$ iteraciones	42
3.4. Evolución temporal de la energía del sistema a partir de los resultados obtenidos con los dos algoritmos señalados, para cada una de las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales mostradas en la tabla 3.1	43

3.5. Evolución temporal del <i>Smallest Alignment Index</i> (SALI) para las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales (b), (d) y (f) mostradas en la tabla 3.1. La escala de los ejes es logarítmica. En la subfigura (c) señalamos con línea discontinua el valor umbral fijado para considerar una determinada órbita como caótica (10^{-8})	45
3.6. Evolución del algoritmo de cálculo de los dos primeros exponentes de Lyapunov, $\tilde{\lambda}_j(t)$, para las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales (b), (d) y (f) mostradas en la tabla 3.1. La escala de los ejes es semilogarítmica (lineal en el eje Y). Los exponentes de Lyapunov se corresponderán con los valores límite de $\tilde{\lambda}_j(t)$	46
3.7. Transformada de Fourier numérica de la señal $x(t)$ para cada una de las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales mostradas en la tabla 3.1. La subfigura (f) muestra superpuestas las transformadas de las señales $x(t)$ e $y(t)$, tal y como indica la leyenda	48
3.8. Secciones de Poincaré para varias órbitas de energía $E = 1/12$. Representamos con un mismo color, pero de diferente intensidad, aquellas secciones correspondientes a sentido creciente de x (mayor intensidad) y a sentido decreciente de x (menor intensidad). Señalamos con una flecha una separatriz del sistema, dibujada en color negro	51
3.9. Detalle de la separatriz señalada en la figura 3.8, dibujada en color negro. Puede notarse que la separatriz deja de ser una curva de trazo definido, pasando a ser un acumulado de puntos en esta región concreta del plano (y, p_y)	52
3.10. Secciones de Poincaré para varias órbitas de energía $E = 0,12$. Representamos con un mismo color, pero de diferente intensidad, aquellas secciones correspondientes a sentido creciente de x y a sentido decreciente de x . Señalamos con flechas las secciones de Poincaré correspondientes a algunas de las órbitas periódicas de las recogidas en la tabla 3.1	53
3.11. Detalle del diagrama de Poincaré correspondiente a $E = 0,12$ en torno a la órbita 1:1 lazo señalada en la figura 3.10. Pueden observarse varias cadenas de islas regulares, rodeando a puntos fijos del mapa de Poincaré. En esta gráfica el cambio de intensidad en el color no tiene ningún significado especial	54
3.12. Secciones de Poincaré para varias órbitas de energía $E = 0,165$. Representamos con un mismo color, pero de diferente intensidad, aquellas secciones correspondientes a sentido creciente de x y a sentido decreciente de x	55

3.13. Secciones de Poincaré correspondientes a dos órbitas de condiciones iniciales $(E, y_0, p_{y_0}) = (0,165, -0,2046, 0,1233)$ (azul) y $(E, y_0, p_{y_0}) = (0,165, -0,2045, 0,1233)$ (rojo). Puede comprobarse que, a pesar de partir de condiciones iniciales muy próximas, ambas tienen secciones de Poincaré muy diferentes 56

3.14. Señales $x(t)$ frente al tiempo correspondientes a dos órbitas de energía $E = 0,165$ y condiciones iniciales $(y_0, p_{y_0}) = (-0,2046, 0,1233)$ (azul), $(y_0, p_{y_0}) = (-0,2045, 0,1233)$ (rojo). Puede comprobarse que ambas señales siguen una evolución temporal muy diferente, a pesar de partir de condiciones iniciales tan próximas. A la derecha, detalle de las señales anteriores cerca del instante $t = 0$. Puede observarse que la forma de ambas señales es muy similar para tiempos pequeños, pero rápidamente las diferencias entre ellas se hacen notables 57

3.15. Sección de Poincaré asociada a una órbita de condiciones iniciales $(E, y_0, p_{y_0}) = (0,165, -0,2045, 0,1233)$ (de color rojo en la figura 3.13). Puede comprobarse cómo una sola órbita caótica tiende a rellenar toda la región accesible conforme el tiempo tiende a infinito 58

3.16. Mapas de estabilidad para diversos valores de la energía. La escala de color representa el valor límite de \log_{10} SALI para cada una de las condiciones iniciales, y está estandarizada para todas las gráficas 60

3.17. Detalle del mapa de estabilidad en torno a una autointersección de la separatriz señalada en la figura 3.8 ($E = 1/12$). Puede comprobarse que el caos emerge en torno a dicha región por la aparición de puntos de tono azulado 61

3.18. Proporción de órbitas estables con condiciones iniciales en el plano (y, p_y) ($x_0 = 0$) frente a la energía del sistema. Para perturbaciones pequeñas dicha proporción es del 100 %, y esta va disminuyendo a partir de un determinado valor crítico (en torno a $E = 0,08$) 62

Índice de tablas

1.1. Puntos críticos del sistema (1.47) y su estabilidad	23
2.1. Parámetros del integrador simpléctico que utilizaremos para el estudio de nuestro sistema. Estos permiten construir un esquema de orden 3 que minimiza el error en norma cuadrática	30
3.1. Valores iniciales de las diferentes órbitas estudiadas en nuestro modelo	39
3.2. Tipología de las órbitas consideradas en la tabla 3.1, y frecuencia de oscilación del modo fundamental cuando corresponde	48

Capítulo 1

Fundamento teórico

En este primer capítulo abordaremos muy sucintamente los contenidos fundamentales sobre Mecánica que necesitaremos para sustentar nuestros argumentos posteriores. Primeramente, haremos una introducción sobre Mecánica lagrangiana y hamiltoniana e introduciremos el concepto de transformación canónica. En segundo lugar, definiremos los conocidos como sistemas integrables, casos de estudio antitéticos del caos. En tercer lugar, presentaremos las características fundamentales del caos y los principales resultados que necesitaremos en nuestro estudio. Por último, introduciremos el modelo de Hénon-Heiles, que será el núcleo de nuestro trabajo.

1.1. Mecánica hamiltoniana. Sistemas integrables

1.1.1. Espacio fásico y hamiltoniana de un sistema. Integrales primeras

El *espacio de configuraciones* M de un sistema de n grados de libertad es aquel en que habitan todos los posibles valores de las coordenadas que describen el estado del mismo. A dicho espacio se le puede dotar de una estructura de variedad diferenciable n -dimensional, lo que nos permite aplicar toda la potencia del Cálculo Diferencial a pequeños entornos de cada uno de sus puntos (como corresponde a los límites de dicha rama de las Matemáticas) [1, 32].

A su vez, en cada punto de una n -variedad puede construirse un espacio vectorial conocido como *espacio tangente*, que no es más que la “linealización” de la variedad M en torno a dicho punto (el hiperplano de dimensión n tangente a la misma) y está generado por los vectores velocidad locales del sistema. Uniendo todos estos hiperplanos (uno por cada punto de la variedad), se construye el *fibrado tangente* TM , el cual a su vez puede ser dotado de una estructura de variedad diferenciable de dimensión $2n$ ¹ [32].

¹*Grosso modo*, las primeras n dimensiones son aportadas por el número de coordenadas necesarias para describir un punto cualquiera de M , mientras que las otras n dimensiones provienen de que, para cada punto de M , podemos

El Principio de Mínima Acción, piedra angular de la Mecánica Clásica, nos permite determinar la trayectoria del sistema $\mathbf{q}(t) = (q_1(t), \dots, q_n(t)) \in M$ resolviendo las n ecuaciones diferenciales de Lagrange asociadas (de segundo orden en el tiempo) [11]:

Principio 1 (de Mínima Acción). Sean $\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{q}^{(2)} \in M$ dos puntos del espacio de configuraciones, y sean $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$ dos instantes de tiempo. Todo sistema mecánico evoluciona en el tiempo recorriendo aquella trayectoria $\mathbf{q}(t) \in M$ entre los instantes t_1 y t_2 que hace extremo el funcional **acción**:

$$S[\mathbf{q}(t)] = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) \quad (1.1)$$

donde $\mathcal{L} : TM \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ es la **función lagrangiana**, que caracteriza la evolución de dicho sistema.

Cualquier espacio vectorial de dimensión finita es isomorfo a su dual algebraico, conformado por todas las formas lineales sobre dicho espacio vectorial. Por lo tanto, a partir del espacio tangente en cada punto puede construirse su dual algebraico, el *espacio cotangente*. Uniendo todos los posibles cotangentes podemos definir otra variedad diferenciable $2n$ -dimensional, conocida como *fibrado cotangente*, T^*M , o *espacio fásico*, Σ ; difeomorfa² al fibrado tangente. Su principal utilidad radica en que este posee de forma natural una estructura *simpléctica*³, la cual es la responsable en un nivel profundo de las simetrías de las ecuaciones dinámicas obtenidas y de las leyes de conservación. Como veremos, es deseable que las transformaciones de coordenadas que apliquemos conserven la estructura anterior para no romper la citada simetría [1].

Por último, mediante la transformada de Legendre podemos construir a partir de \mathcal{L} la *función hamiltoniana* \mathcal{H} :

$$\mathcal{H} : T^*M \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$$

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

siendo $p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j}$. La hamiltoniana está definida sobre el espacio fásico, la cual nos permite obtener la evolución del sistema gracias al Principio de Mínima Acción, aprovechando además las ventajas que ofrece trabajar en el fibrado cotangente. En el contexto de la Mecánica hamiltoniana, a las coordenadas $\mathbf{q}(t) = (q_1(t), \dots, q_n(t))$ de M se las denomina *coordenadas generalizadas* y a las formas lineales $\mathbf{p}(t) = (p_1(t), \dots, p_n(t))$ que pertenecen al espacio cotangente *momentos*

encontrar n vectores velocidad linealmente independientes.

²Dos conjuntos se dicen *difeomorfos* si existe entre ellos una aplicación biyectiva y diferenciable, con inversa también biyectiva y diferenciable.

³El término *simpléctico*, del griego $\sigma\upsilon\mu\pi\lambda\epsilon\kappa\tau\iota\kappa\omicron\varsigma$, quiere decir “plegado”, “intercambiado”. Véase [1] para una introducción a las variedades simplécticas.

generalizados [11, 1]. Al par $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) \in \Sigma$ lo denominaremos *órbita* del sistema en el espacio fásico.

En el formalismo hamiltoniano, las ecuaciones de evolución homólogas para la órbita descrita por el sistema son las denominadas *ecuaciones canónicas* o de Hamilton⁴:

$$\dot{q}_j = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j}, \quad \forall j = 1, \dots, n \quad (1.2)$$

Estas $2n$ ecuaciones diferenciales son de primer orden en el tiempo, a diferencia de las ecuaciones de Lagrange. El Teorema de Picard [30] garantiza que el estado del sistema en un instante $t > t_0$ está unívocamente determinado por su estado inicial $(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0) = (\mathbf{q}(t_0), \mathbf{p}(t_0))$, además bajo hipótesis no muy exigentes (por ejemplo, que las derivadas parciales $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j}$, $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j}$ y $\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_j \partial p_k}$ existan y sean continuas). Por tanto, **la Mecánica Clásica es una teoría determinista**.

Para una gran mayoría de sistemas clásicos, la función hamiltoniana puede expresarse como suma de la energía cinética $T = T(\mathbf{p}, t)$ y la energía potencial $V = V(\mathbf{q}, t)$, siendo la primera una forma cuadrática en \mathbf{p} . En estos casos, la hamiltoniana coincidirá con la *energía mecánica* del sistema, que a todos nos es tan familiar. Además, si $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ no depende explícitamente del tiempo (sistemas conservativos), entonces $\mathcal{H}(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) = \mathcal{H}(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0), \forall t > t_0$; es decir, **la energía se conserva**.

En general, aquellas funciones dinámicas (funciones de las coordenadas y momentos generalizados, y del tiempo) que se mantienen constantes a lo largo de la órbita se denominan *integrales primeras de movimiento*. La energía será una integral primera bajo el supuesto anterior, y en general se tiene el siguiente resultado [11]:

Proposición 1. Consideremos un sistema dinámico descrito por la hamiltoniana $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, y sea $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ una determinada órbita en el espacio fásico. La evolución temporal de una función dinámica $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ a lo largo de dicha órbita viene dada por la expresión:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, \mathcal{H}\}$$

donde $\{f, g\} := \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q_j} \right)$ denota el **corchete de Poisson** de f y g . Por lo tanto, si una determinada función dinámica satisface las condiciones:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \quad y \quad \{f, \mathcal{H}\} = 0$$

⁴Estas ecuaciones ponen de manifiesto que la trayectoria del sistema en el espacio fásico es la *curva integral* [32] del campo vectorial hamiltoniano $(\nabla_{\mathbf{p}} \mathcal{H}, -\nabla_{\mathbf{q}} \mathcal{H})^t$.

entonces es una **integral primera** de movimiento.

Para obtener la solución de las ecuaciones canónicas se requiere determinar un total de $2n$ constantes de integración (correspondientes a las $2n$ condiciones iniciales). Si fuera posible despejar dichas constantes en función de las coordenadas, estas formarían un conjunto de $2n$ integrales primeras de movimiento, de las cuales $2n - 1$ son independientes entre sí⁵ para un sistema conservativo. Esta familia será maximal en el sentido de que cualquier otra integral primera tendrá que poder escribirse en función de las anteriores.

En los sistemas conservativos, el conjunto

$$\text{SEC} = \{(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in \Sigma \mid \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E\} \quad (1.3)$$

define una $(2n - 1)$ -subvariedad en Σ siempre que E sea un valor regular para la hamiltoniana⁶. En cualquier caso, la órbita permanecerá en la SEC a lo largo del tiempo. Además, para estos sistemas el mismo Teorema de Picard nos asegura que dos trayectorias del espacio fásico correspondientes a diferentes condiciones iniciales nunca se cortan [30].

1.1.2. Transformaciones canónicas

Podemos reescribir las ecuaciones (1.2) en forma matricial, denotando por $\boldsymbol{\eta} := (\mathbf{q}, \mathbf{p})^t$ y por \mathbf{I}_n y \mathbf{O}_n a las matrices identidad y nula n -dimensionales respectivamente:

$$\dot{\boldsymbol{\eta}} = \mathbf{S} \nabla_{\boldsymbol{\eta}} \mathcal{H}, \quad \text{con } \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{O}_n & \mathbf{I}_n \\ -\mathbf{I}_n & \mathbf{O}_n \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

Esta reescritura nos permite establecer de forma compacta una condición necesaria que deben cumplir aquellas transformaciones $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \mapsto (\mathbf{Q}, \mathbf{P})$ que dejan inalterada la forma de las ecuaciones de Hamilton (lo que se conoce como *transformaciones canónicas*). Si $\boldsymbol{\zeta} = (\mathbf{Q}, \mathbf{P})^t = \boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{\eta})$ denota las nuevas coordenadas en función de las antiguas, esta condición resulta [11]:

Proposición 2 (Condición simpléctica de las transformaciones canónicas). *Supongamos que $\boldsymbol{\zeta} = (\mathbf{Q}, \mathbf{P})^t = \boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{\eta})$ es una transformación biyectiva y canónica; esto es,*

$$\dot{\boldsymbol{\eta}} = \mathbf{S} \nabla_{\boldsymbol{\eta}} \mathcal{H}, \quad \dot{\boldsymbol{\zeta}} = \mathbf{S} \nabla_{\boldsymbol{\zeta}} \mathcal{H},$$

con \mathbf{S} la matriz definida en (1.4) y $\nabla_{\mathbf{x}} \mathcal{H}$ el gradiente de \mathcal{H} respecto a las variables \mathbf{x} . Si denotamos

⁵Véase el Teorema 2 para una definición precisa de independencia de integrales primeras.

⁶Si $f : M \rightarrow N$ es diferenciable, diremos que $q \in f(M)$ es un *valor regular* de f si la diferencial $df_p : TM \rightarrow TN$ es sobreyectiva para cada $p \in f^{-1}(\{q\})$ [32].

por $\mathbf{J} = \left(\frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_j} \right)_{ij}$ a la jacobiana de la transformación (que será invertible), entonces debe darse la igualdad:

$$\mathbf{J}^T \mathbf{S} \mathbf{J} = \mathbf{S} \quad (1.5)$$

Otra forma usual de caracterizar una transformación canónica $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \mapsto (\mathbf{Q}, \mathbf{P})$ es forzando a que el Principio de Mínima Acción sea “covariante” frente a dichas transformaciones. Es decir, fijando los dos instantes de tiempo t_1, t_2 , si la órbita $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ minimiza el funcional acción⁷

$$\mathcal{S}[\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{j=1}^n p_j dq_j - \mathcal{H} dt \right) \quad (1.6)$$

entonces $(\mathbf{Q}(t), \mathbf{P}(t))$ también debería minimizar el funcional

$$\mathcal{S}'[\mathbf{Q}(t), \mathbf{P}(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{j=1}^n P_j dQ_j - \mathcal{H}' dt \right) \quad (1.7)$$

donde \mathcal{H}' es la hamiltoniana tras sufrir la transformación (en el caso más general puede cambiar tanto de valor como de forma). Para que ambas trayectorias sean extremos de sendos funcionales, es preciso que los integrandos difieran en una diferencial exacta $dF(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$ [11]:

$$dF(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t) = \sum_{j=1}^n (p_j dq_j - P_j dQ_j) + (\mathcal{H}' - \mathcal{H})dt \quad (1.8)$$

A la función $F(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$ se la conoce como *función generatriz de la transformación canónica*. Hay varios “tipos” de funciones generatrices según las variables de las que estas dependen [11]. Por ejemplo, si aplicamos una transformación de Legendre a $F(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$ obtenemos otra función generatriz $\Phi(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t)$, cuya diferencial debe satisfacer:

$$d\Phi(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) = \sum_{j=1}^n p_j dq_j + \sum_{j=1}^n Q_j dP_j + (\mathcal{H}' - \mathcal{H})dt \quad (1.9)$$

y dado que las variables \mathbf{q}, \mathbf{P} y t son independientes entre sí, esto fuerza a que las relaciones entre las coordenadas antiguas y las nuevas sean:

$$p_j = \frac{\partial \Phi}{\partial q_j} \quad Q_j = \frac{\partial \Phi}{\partial P_j} \quad \forall j = 1, \dots, n; \quad \mathcal{H}' = \mathcal{H} + \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad (1.10)$$

⁷El funcional acción se ha obtenido a partir del original (1.1), aplicando convenientemente la transformada de Legendre a \mathcal{L} como hemos señalado anteriormente.

Nótese que la transformación identidad,

$$Q_j = q_j, P_j = p_j, \forall j = 1, \dots, n \quad (1.11)$$

es una transformación canónica de generatriz $\Phi(\mathbf{q}, \mathbf{P}) = \sum_j q_j P_j$. Enumeramos a continuación algunas propiedades fundamentales que satisfacen estas transformaciones [1, 11]:

1. Mantienen inalterados los corchetes de Poisson (véase la Proposición 1): $\{f, g\}_{(q,p)} = \{f, g\}_{(Q,P)}$. En particular, si $f(q, p)$ es una integral primera de movimiento, $f(Q, P)$ también lo será.
2. (Integral invariante de Poincaré) Si γ es una curva cerrada en el espacio fásico y Γ su imagen mediante una transformación canónica, la integral de línea de la 1-forma $\sum_{j=1}^n p_j dq_j$ coincide para ambas curvas:

$$\sum_{j=1}^n \oint_{\gamma} p_j dq_j = \sum_{j=1}^n \oint_{\Gamma} P_j dQ_j \quad (1.12)$$

3. (Teorema de Liouville) La Proposición 2 conlleva a que $|\det \mathbf{J}| = 1$, por lo que las transformaciones canónicas preservan el elemento de volumen del espacio fásico⁸

$$dq_1 \dots dq_n dp_1 \dots dp_n$$

Hay un tipo especialmente interesante de transformaciones canónicas: las denominadas *transformaciones canónicas infinitesimales* (en adelante TCI). Estos mapas se caracterizan por variar infinitesimalmente las coordenadas y momentos generalizados:

$$Q_j = q_j + \delta q_j \quad P_j = p_j + \delta p_j \quad (1.13)$$

o equivalentemente, en forma vectorial:

$$\zeta = \eta + \delta \eta \quad (1.14)$$

con $\|\delta \eta\|$ suficientemente pequeño. Una candidata natural a función generatriz de una TCI es una perturbación de la identidad de la forma:

$$\Phi(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) = \sum_{j=1}^n q_j P_j + \varepsilon G(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) \quad (1.15)$$

⁸Atendiendo a una nota al pie anterior, si entendemos la trayectoria del sistema como la curva integral asociada al campo tangente $\mathbf{S}\nabla_{\eta} \mathcal{H}$, el Teorema de Liouville lo que establece es la “incompresibilidad” del “fluido hamiltoniano” (compruébese que la divergencia del campo es nula).

con ε un parámetro suficientemente pequeño. A la función G se le denomina, por abuso del lenguaje, *generatriz de la TCI*⁹. Aplicando las relaciones (1.10), podemos encontrar la ecuación que debe satisfacer el término de desviación $\delta\eta$ para que la transformación sea canónica:

$$\delta\eta = \varepsilon\{\eta, G\} \quad (1.16)$$

Esta igualdad también se puede reescribir en forma matricial:

$$\delta\eta = \varepsilon\mathbf{J}\nabla_{\eta}G \quad (1.17)$$

Una TCI de especial importancia es aquella que tiene por generatriz $G = \mathcal{H}$. Puede comprobarse que esta transformación se corresponde con la *evolución temporal infinitesimal* (de intervalo temporal ε), ya que (1.17) coincide con las ecuaciones canónicas (1.4) en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ (en este caso, ε tendrá dimensiones de tiempo). Atendiendo a esta consideración, podemos enunciar la siguiente definición-proposición:

Definición 1. Consideremos un cierto sistema dinámico y sea $\tau \in \mathbb{R}$. Definimos el mapa *evolución temporal* de paso τ , $\mathcal{M}_{\tau} : \Sigma \rightarrow \Sigma$, como:

$$\mathcal{M}_{\tau}(\eta(t)) = \eta(t + \tau) \quad (1.18)$$

siendo $\eta(t)$ la órbita del sistema en un determinado instante t . Este mapa es una transformación canónica gracias a que la evolución temporal infinitesimal es una TCI (componiendo una sucesión de transformaciones infinitesimales podemos llegar a obtener \mathcal{M}_{τ}).

Puede probarse que la función generatriz de la transformación canónica anterior (en su versión no infinitesimal) es la función $-\mathcal{S}$, con \mathcal{S} la acción del sistema (véase una nota al pie anterior) como función de las coordenadas finales¹⁰. También puede demostrarse que dicha función satisface la conocida como *ecuación de Hamilton-Jacobi*¹¹ [11, 17]:

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} + \mathcal{H}(\mathbf{q}, \nabla_{\mathbf{q}}\mathcal{S}, t) = 0 \quad (1.19)$$

Por último, enunciaremos un Teorema basado en la incompresibilidad de los volúmenes del fluido hamiltoniano, con especial interés en el contexto de la Física Estadística [1]:

⁹La función G depende efectivamente de \mathbf{q} y \mathbf{P} , aunque a primer orden en ε se tiene que $\varepsilon G(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) = \varepsilon G(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$.

¹⁰Con esto nos referimos a que el funcional acción (1.1) es evaluado en una curva que coincide con aquella que lo minimiza o maximiza salvo en los extremos, los cuales pueden variar. Para distinguir ambas dependencias, muchos textos se refieren a esta última como *función principal de Hamilton*; véase [17, 11] para más información.

¹¹Esta ecuación proporciona una vía para resolver el problema dinámico. Como señalaremos más adelante, a partir de un desarrollo perturbativo de su solución también permite resolverlo numéricamente (de forma aproximada).

Teorema 1 (de Recurrencia de Poincaré). *Consideremos una hamiltoniana $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, con un espacio fásico acotado, y sea $A \subset \Sigma$. Todas las órbitas que comienzan en $\boldsymbol{\eta}_0 := \boldsymbol{\eta}(t_0) \in A$ volverán a A en un instante $t > t_0$ superior, excepto para un subconjunto de medida nula de condiciones iniciales de A .*

1.1.3. Sistemas integrables

En la sección anterior comentamos que todo sistema de n grados de libertad posee, a lo sumo, $2n$ integrales de movimiento. Si las conociéramos todas, las ecuaciones de Hamilton serían resolubles por cuadraturas¹². Sin embargo, existe una familia de sistemas conservativos para los cuales con conocer únicamente n integrales primeras (incluyendo la energía), las ecuaciones canónicas ya cumplen esta propiedad. A este tipo de sistemas se les denomina *sistemas integrables* y serán de gran importancia para el desarrollo de este trabajo.

El siguiente teorema proporciona condiciones suficientes para que un sistema sea integrable [1]:

Teorema 2 (Sistemas integrables en el sentido de Liouville). *Consideremos un sistema de n grados de libertad, del que se conocen n integrales primeras $\{f_1, \dots, f_n\}$. Definimos:*

$$M_{\mathbf{f}} := \{\boldsymbol{\eta} \in \Sigma : f_i(\boldsymbol{\eta}) = f_{i0}, i = 1, \dots, n\}$$

para ciertas constantes f_{10}, \dots, f_{n0} . Supongamos que:

1. Las n 1-formas df_1, \dots, df_n son linealmente independientes en cada punto de $M_{\mathbf{f}}$. Es decir, si

$$df_i = \sum_{j=1}^{2n} g_{ij}(\boldsymbol{\eta}) d\eta_j = \sum_{j=1}^{2n} \frac{\partial f_i}{\partial \eta_j} d\eta_j \quad \forall i = 1, \dots, n$$

entonces $\det(g_{ij}(\boldsymbol{\eta})) \neq 0$, para todo $\boldsymbol{\eta} \in M_{\mathbf{f}}$.

2. $\{f_i, f_j\} = 0, \forall i, j = 1, \dots, n$ (las integrales primeras están **en involución**).

Entonces $M_{\mathbf{f}}$ es una n -subvariedad del espacio fásico Σ , y el movimiento del sistema queda confinado por completo en $M_{\mathbf{f}}$, siendo $\mathcal{H} = f_j$ para algún $j = 1, \dots, n$. Además, si $M_{\mathbf{f}}$ es compacta y conexa, es difeomorfa al toro $\mathbb{T}^n := S^1 \times \dots \times S^1$, donde S^1 denota la circunferencia unidad.

Si nuestro sistema es integrable, el teorema anterior nos garantiza la existencia de una transformación canónica $\mathbf{q} \mapsto \boldsymbol{\phi}, \mathbf{p} \mapsto \mathbf{I}$ que verifica que la hamiltoniana en las nuevas variables

¹²Se dice que una ecuación diferencial es *resoluble por cuadraturas* si su solución general (ya sea en forma implícita o explícita) puede escribirse a partir de funciones elementales e involucra una o más integrales.

sólo depende de \mathbf{I} [1]. De hecho, cualquier conjunto de funciones independientes de las n integrales primeras f_1, \dots, f_n estará conformado por posibles candidatos a los nuevos momentos generalizados, aunque no tienen por qué satisfacer las ecuaciones canónicas (1.2). Existe un conjunto particular de estas funciones, $\mathbf{I}(f_1, \dots, f_n)$, que sí tiene las propiedades adecuadas. Junto con su conjunto de coordenadas generalizadas, $(\boldsymbol{\phi}, \mathbf{I})$ se conocen como *variables acción-ángulo*.

Se puede probar (véase [1, 21]) que las **variables acción** toman la forma

$$I_j = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_j} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}, \quad j = 1, \dots, n \quad (1.20)$$

donde la integral está hecha a lo largo de una de las curvas generatrices del toro γ_j n -dimensional¹³ (por ejemplo, la curva $\phi_i = \phi_{i0}, \forall i \neq j$). Nótese que la integral de (1.20) es invariante si γ_j evoluciona bajo la acción de la evolución temporal (gracias a (1.12)), por lo que en efecto $\mathbf{I} = \text{cte}$. Denotemos por $\mathcal{S}(\mathbf{q}, \mathbf{I})$ a la generatriz de la transformación canónica correspondiente. Si aplicamos las ecuaciones de transformación (1.10), obtenemos que:

$$\phi_j = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial I_j} \quad p_j = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial q_j} \quad \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \mathcal{H}(\mathbf{I}) \quad (1.21)$$

Denotando por $\Delta_i \mathcal{S}$, $\Delta_i \boldsymbol{\phi}$ a los respectivos cambios de \mathcal{S} y $\boldsymbol{\phi}$ a lo largo de una vuelta por γ_i , podemos deducir que [21]:

$$\begin{aligned} \Delta_i \mathcal{S} &= \oint_{\gamma_i} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = 2\pi I_i \\ \Delta_i \phi_j &= \frac{\partial}{\partial I_j} \Delta_i \mathcal{S} = 2\pi \delta_{ij} \end{aligned}$$

Es decir, las coordenadas ϕ_j se comportan como variables angulares, ya que ante una vuelta completa a γ_j estas aumentan en 2π . Es por ello que se denominan *variables ángulo* de un sistema integrable. De hecho, estas se pueden entender como las n coordenadas que describen cada punto del toro al que es difeomorfo $M_{\mathbf{f}}$.

La evolución temporal de las nuevas coordenadas viene determinada por las ecuaciones canónicas sobre la nueva hamiltoniana $\mathcal{H}(\mathbf{I})$:

$$\dot{I}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{I})}{\partial \phi_j} = 0 \quad \dot{\phi}_j = \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{I})}{\partial I_j} =: \omega_j = \text{cte.} \quad j = 1, \dots, n \quad (1.22)$$

¹³Hemos señalado en el Teorema 2 que un toro n -dimensional puede escribirse como producto cartesiano de n circunferencias. Podemos entender cada una de las circunferencias anteriores como las curvas generatrices de dicho toro. Por ejemplo, en un toro bidimensional una de las generatrices rodearía al “agujero” del mismo, mientras que la otra “abrazaría” al toro atravesando el agujero.

La primera tanda de ecuaciones es evidente a partir de los argumentos dados hasta ahora. La segunda tanda es resultado de que $\mathcal{H}(\mathbf{I})$ es constante, por lo que cualquier derivada parcial respecto de I_j (también constante) resultará ser constante. Por lo tanto, las ecuaciones canónicas para un sistema integrable pueden resolverse fácilmente:

$$\mathbf{I}(t) = \mathbf{I}(0) = \text{cte.} \quad \boldsymbol{\phi}(t) = \boldsymbol{\omega}t + \boldsymbol{\phi}(0) \quad (1.23)$$

Si entendemos el conjunto de variables $\boldsymbol{\phi}$ como variables angulares, a partir de la ecuación de evolución (1.23) parece natural interpretar las constantes ω_j como n frecuencias de oscilación independientes del sistema. Por lo tanto, la trayectoria del sistema sobre el n -toro M_f será una superposición de n movimientos periódicos, cada uno de frecuencia ω_j . Sin embargo, en general la trayectoria completa no será periódica. Solamente cuando las frecuencias sean *conmensurables*; i.e., existan $m_1, \dots, m_n \in \mathbb{Z}$ tales que:

$$\sum_{j=1}^n m_j \omega_j(\mathbf{I}) = 0 \quad (1.24)$$

la trayectoria será completamente periódica y, de hecho, cerrada sobre el toro. Los toros para los que esto ocurre se conocen como *toros resonantes*. Cuando las frecuencias de oscilación del sistema sean independientes (en el mismo sentido que la independencia de las n variables acción del Teorema 2), se tendrá que:

$$\det \left(\frac{\partial \omega_i}{\partial I_j} \right) \neq 0 \quad (1.25)$$

En tal situación, diremos que el sistema integrable es *no degenerado*, y podremos etiquetar equivalentemente a los toros por sus n frecuencias naturales. Para estos sistemas, ya que los números racionales forman un subconjunto de medida nula en los reales, la conmensurabilidad *casi nunca* se dará. Es decir, si tomamos un punto arbitrario $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^n$, con probabilidad 1 las frecuencias resultantes no serán conmensurables, y el movimiento se dirá entonces *cuasiperiódico*. En estos casos, las trayectorias rellenan densamente la superficie toroidal, no cerrándose nunca (véase la figura 1.1).

Por último, para obtener la evolución temporal del sistema en las coordenadas antiguas, basta revertir el cambio de variables (ecuaciones (1.21)), suponiendo que la transformación sea biyectiva. Hemos conseguido integrar así las ecuaciones canónicas de un sistema integrable. Nótese que, en particular, **todo sistema conservativo de un grado de libertad** que tenga una región accesible acotada dentro de la SEC **es integrable** al cumplir trivialmente el Teorema 2, y su trayectoria es puramente periódica (al existir una única frecuencia natural).

A la vista de lo que acabamos de exponer, el espacio fásico de un sistema integrable será difeomorfo al producto $\Omega \times \mathbb{T}^n$, con $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un cierto abierto. El conjunto Ω es el de los po-

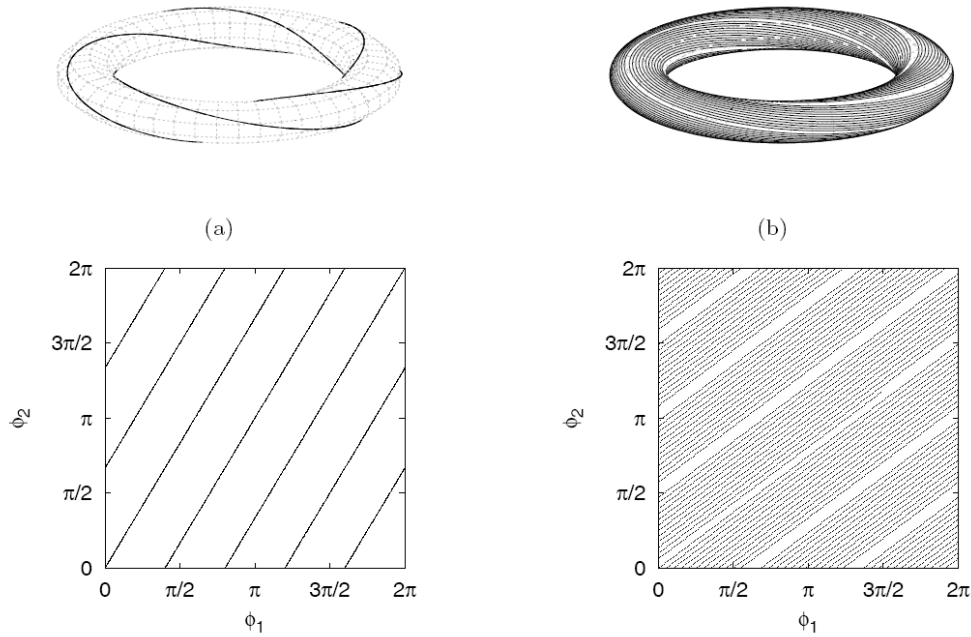


Figura 1.1: Trayectorias en un toro bidimensional. Arriba, vista tridimensional de dichas trayectorias para (a) frecuencias conmensurables, (b) frecuencias inconmensurables. Abajo, vista de las mismas trayectorias en la representación modular típica. Tomada de [7]

sibles valores que pueden tomar las variables acción. En cierto modo, los toros “rellenan” el espacio fásico y las variables acción determinan sus “radios”. Podemos entender este hecho más fácilmente si estudiamos el ejemplo paradigmático de sistema integrable: el oscilador armónico n -dimensional. La hamiltoniana de dicho sistema viene dada por:

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{1}{2} p_j^2 + \frac{1}{2} \omega_j^2 q_j^2 \right) \tag{1.26}$$

(hemos elegido todas las masas iguales a 1). Un posible conjunto de n integrales primeras en convolución son las n funciones hamiltonianas $\mathcal{H}_j = \frac{1}{2} p_j^2 + \frac{1}{2} \omega_j^2 q_j^2$. En este caso, el espacio fásico es $\Sigma = (0, \infty)^n \times \mathbb{T}^n$. Las n frecuencias naturales de oscilación son los parámetros $\omega_1, \dots, \omega_n$. En variables acción-ángulo, la hamiltoniana anterior resulta:

$$\mathcal{H}(\mathbf{I}) = \sum_{j=1}^n I_j \omega_j \tag{1.27}$$

En la figura 1.2 se muestran varios toros (en este caso, curvas difeomorfas a circunferencias) correspondientes al oscilador armónico monodimensional de frecuencia $\omega = 2$ para varios valores de la energía. En el caso particular de sistemas de un grado de libertad, los toros coinciden con las SECs. Puede verse también cómo las elipses rellenan todo el espacio fásico conforme aumenta la energía del oscilador.

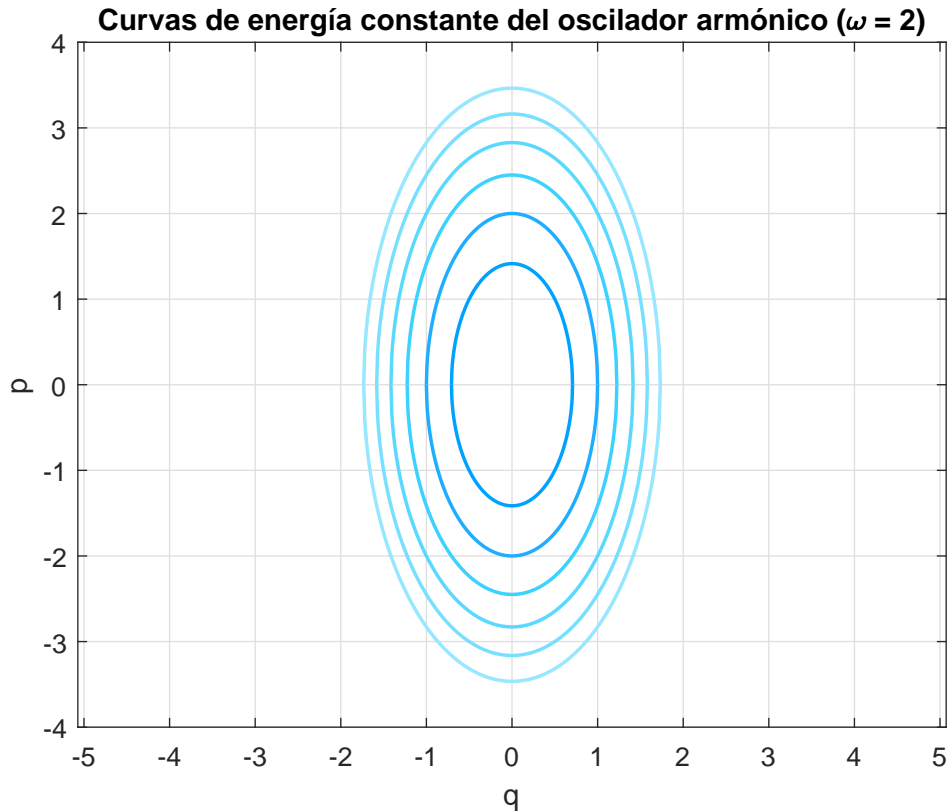


Figura 1.2: SECs del oscilador armónico monodimensional de frecuencia $\omega = 2$ para energías $E \in \{1, \dots, 6\}$ (equivalentemente, $I \in \{1/2, 1, 3/2, \dots, 3\}$)

1.2. Caos en sistemas hamiltonianos

1.2.1. Nociones de caos en sistemas dinámicos

No existe, a día de hoy, una definición precisa de lo que se entiende por caos. Cuando esto se intenta, normalmente se introducen los conocidos como sus *marcadores* o *indicadores*, tanto cualitativos como cuantitativos. En esta sección, nos limitaremos a enunciar y comentar brevemente los principales marcadores del caos referidos a un sistema diferencial arbitrario¹⁴

$$y' = f(t, y) \quad y(t_0) = y_0 \quad (1.28)$$

con $f : \Omega \subset \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}^n$ tal que verifique las hipótesis del Teorema de Picard [30], y será con estos SDOs con los que posteriormente trabajaremos en nuestro caso de estudio.

Las características más importantes que presenta el caos son las siguientes [7]:

1. **Gran sensibilidad a las condiciones iniciales.** Puede probarse, bajo las mismas hipó-

¹⁴En esta sección, nos referiremos por trayectorias a las curvas solución del SDO (1.28) $y(t)$, que habitan en una variedad M de dimensión n .

tesis del Teorema de Picard, que las soluciones de (1.28) son continuas respecto a sus condiciones iniciales. Sin embargo, esto no garantiza en absoluto que para tiempos largos la solución se mantenga “cerca” de la condición inicial. Por tanto, pequeñas imprecisiones en los datos iniciales pueden conllevar a soluciones completamente dispares conforme el tiempo avanza¹⁵. Los sistemas caóticos, de hecho, presentan esta cualidad de forma muy notable: las diferencias entre dos trayectorias inicialmente muy próximas aumentan exponencialmente con el tiempo, $\sim e^{\lambda t}$, siendo λ el *exponente de Lyapunov* (véase la sección 2.2.1). Por lo tanto, en la práctica nuestro conocimiento real de su comportamiento será limitado, debido a los errores de truncamiento y redondeo introducidos al resolver numéricamente sus ecuaciones de evolución.

2. **Gran sensibilidad en los parámetros del modelo.** No solamente son sensibles las soluciones de una dinámica caótica a las condiciones iniciales, sino también a pequeños cambios en las leyes que la rigen. En el modelo en que centraremos nuestro estudio, que resulta ser una perturbación de un sistema integrable, la intensidad de la misma influye de manera dramática en el comportamiento del sistema.
3. **Geometría fractal y atractores extraños.** En muchas situaciones, las órbitas “tienden” hacia un subconjunto de \mathbb{R}^n que presenta dimensión fractal (caracterizada, *grosso modo*, por no ser necesariamente entera). La existencia de estos *atractores extraños* (así se denominan) está condicionada a valores negativos de la divergencia $\nabla_y \cdot f(t, y)$ (sistemas disipativos). Para sistemas donde esta divergencia sea nula, como el que estudiaremos, no observaremos atractores extraños [9].
4. **Espectro “continuo” de frecuencias de oscilación.** En movimientos periódicos o cuasiperiódicos, el espectro de frecuencias de la señal resulta ser discreto (su transformada de Fourier es una combinación lineal de deltas de Dirac). Para movimientos periódicos aparecerán picos en frecuencias cuyos cocientes sean racionales; para los cuasiperiódicos aparecerán en frecuencias no conmensurables. Muchos sistemas caóticos presentan una “banda continua” de frecuencias, formada por lo que parecen ser picos de menor altura que los principales. Uno podría pensar que dicha banda continua es debida a un cierto “ruido” en la señal, aunque debemos tener claro que esto no es posible (la naturaleza del ruido es estocástica, mientras que la del caos es determinista).
5. **Sensibilidad a la dimensionalidad del problema.** El Teorema de Poincaré-Bendixson garantiza la no-existencia del caos para sistemas autónomos (independientes del tiempo) con $n \leq 2$. Es decir, cualquier ecuación diferencial de segundo orden que no dependa del tiempo (por ejemplo, la de un oscilador armónico) presentará un comportamiento bastante regular (de trayectoria cíclica o que tienda a una trayectoria cíclica [30]). Sin embargo, la mera introducción del tiempo en la ecuación diferencial (es el caso del oscilador armónico

¹⁵Fue este el motivo, de hecho, por el que Edward Lorenz se topó por primera vez con el caos en los años 60, mientras analizaba varios modelos meteorológicos.

forzado) aumenta en una unidad la dimensión del problema, lo que conlleva a la aparición del caos [9].

6. **Determinismo y estocasticidad.** El Teorema de Picard garantiza, como comentamos al inicio, que el valor de $y(t)$ está unívocamente determinado por el valor de y_0 , por lo que *el caos no es un subproducto del azar*. Sin embargo, el aspecto errático de la dinámica del sistema conforme el tiempo avanza hace que la estadística sea una herramienta útil para su estudio.

1.2.2. ¿Qué entenderemos por caos hamiltoniano?

Nosotros centraremos nuestro estudio en aquellos SDOs que resulten ser las ecuaciones canónicas de una determinada hamiltoniana $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, independiente del tiempo. Estos sistemas diferenciales conservan los volúmenes en el espacio fásico gracias al Teorema de Liouville, por lo que no se observarán atractores en este tipo de sistemas de ecuaciones diferenciales. En consecuencia, la transición hacia el caos será de naturaleza esencialmente distinta a la de los sistemas disipativos.

El carácter integrable de un sistema dinámico es uno de los principales factores que nos permite determinar si este presentará o no caos. Para estos sistemas el espectro de frecuencias es discreto¹⁶, por lo que no presentarán un comportamiento caótico. Es la ausencia de integrabilidad (es decir, la ausencia de esas n integrales primeras en involución) la que abre directamente las puertas al caos. De hecho, una perturbación de un sistema integrable de hamiltoniana \mathcal{H}_0 :

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\phi}, \mathbf{I}) = \mathcal{H}_0(\mathbf{I}) + \varepsilon \mathcal{H}_1(\boldsymbol{\phi}, \mathbf{I}) \quad (1.29)$$

con $\varepsilon \in \mathbb{R}$ el parámetro perturbativo, es suficiente para que el carácter regular de las órbitas se rompa y aparezca la banda continua de frecuencias antes mencionada en sus espectros. Poincaré demostró que, para $\varepsilon \neq 0$, (1.29) no admite en general integrales primeras aparte de la energía (causado por lo que se conoce como *problema de los denominadores pequeños*). Para entender este hecho, podemos razonar de la siguiente forma [7]. Supongamos que $F_0(\mathbf{I})$ es una de las n constantes de movimiento en involución del sistema sin perturbar. Si ε es suficientemente pequeño, es lógico buscar una integral primera para la hamiltoniana (1.29) de la forma:

$$F(\mathbf{I}, \boldsymbol{\phi}) = F_0(\mathbf{I}) + \varepsilon F_1(\mathbf{I}, \boldsymbol{\phi}) + \varepsilon^2 F_2(\mathbf{I}, \boldsymbol{\phi}) + \dots \quad (1.30)$$

Tanto F como las F_k son periódicas en $\boldsymbol{\phi}$, ya que dicha variable es de tipo angular (véase la sección anterior). Por tanto, si F_1 y \mathcal{H}_1 son suficientemente regulares, admitirán un desarrollo

¹⁶Por tanto, para observar el caos necesitamos estudiar un sistema de, como mínimo, dos grados de libertad, ya que todo sistema físico conservativo de movimiento acotado y un grado de libertad es integrable.

en serie de Fourier de la forma:

$$F_1(\mathbf{I}, \boldsymbol{\phi}) = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^n} f_{\mathbf{m}}^{(1)}(\mathbf{I}) e^{i\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\phi}} \quad (1.31)$$

$$\mathcal{H}_1(\mathbf{I}, \boldsymbol{\phi}) = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^n} h_{\mathbf{m}}^{(1)}(\mathbf{I}) e^{i\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\phi}} \quad (1.32)$$

Como F es una integral primera asociada a \mathcal{H} , por la Proposición 1:

$$\{\mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{H}_1, F_0 + \varepsilon F_1 + \varepsilon^2 F_2 + \dots\} = 0 \quad (1.33)$$

A partir de esta condición, agrupando los sumandos para las mismas potencias de ε , los términos asociados a los dos primeros órdenes del desarrollo resultan:

$$\{\mathcal{H}_0, F_0\} = 0 \quad (1.34)$$

$$\{\mathcal{H}_0, F_1\} + \{\mathcal{H}_1, F_0\} = 0 \quad (1.35)$$

La condición (1.34) es evidente, ya que suponíamos que F_0 era una integral primera del sistema no perturbado. Por otro lado, si introducimos (1.31) y (1.32) en (1.35), consideramos que F_0 coincide con una de las variables acción (por ejemplo, I_1) y tenemos en cuenta que los términos $e^{i\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\phi}}$ son linealmente independientes, obtenemos la siguiente expresión para F_1 :

$$F_1(\mathbf{I}, \boldsymbol{\phi}) = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^n} \frac{m_1 h_{\mathbf{m}}^{(1)}(\mathbf{I})}{\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega}_0} e^{i\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\phi}} \quad (1.36)$$

donde $\omega_{0j} = \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial I_j}$ para $j = 1, \dots, n$. La serie de Fourier anterior nos muestra directamente por qué no pueden existir las mencionadas integrales primeras en un sistema perturbado. Dado que la suma se extiende a todo \mathbb{Z}^n , siempre existirán unos \mathbf{m} que hagan el denominador muy pequeño para los sumandos correspondientes (es más, cuando existan frecuencias conmensurables, estos denominadores serán idénticamente nulos). Por lo tanto, la convergencia de la serie no está ni mucho menos garantizada, donde además la perturbación destruye los toros resonantes al anular los denominadores asociados.

El razonamiento naíf anterior parece desesperanzador, ya que muestra que cualquier perturbación de un sistema periódico, *por pequeña que sea*, destruye dicho comportamiento “regular”, esperando así que la órbita manifieste un carácter puramente caótico. Sin embargo, aunque dichas integrales primeras desaparezcan, no necesariamente se acaba con ese “orden”. La Luna, aunque mucho más pequeña que el Sol y la Tierra, introduce perturbaciones evidentes en el movimiento de esta alrededor de la estrella. Sin embargo, también es evidente que la dinámica de

nuestro planeta goza de una periodicidad prácticamente absoluta. Veremos en la siguiente sección que la intensidad de la perturbación será importante a la hora de determinar el número de toros que “sobreviven” en la SEC.

Entenderemos por **caos hamiltoniano**, por tanto, aquel que surge cuando perturbamos la hamiltoniana de un sistema integrable. A modo de resumen, enunciemos para terminar con esta sección las características más señaladas de esta vertiente del caos, las cuales discutiremos en las próximas páginas:

- (Teorema KAM) La integrabilidad del sistema se rompe por actuación de la perturbación, aunque si esta es pequeña *casi todos*¹⁷ los toros sobreviven.
- No existen atractores debido al Teorema de Liouville. Las órbitas caóticas tienden a rellenar todo el espacio accesible.
- (Difusión de Arnold) Ya que la SEC es tridimensional para sistemas de dos grados de libertad, los toros separan en dos regiones disjuntas el espacio accesible dentro de la misma. Sin embargo, cuando el sistema presenta tres o más grados de libertad esto no ocurre, y Arnold señaló que la partícula podría pasar por regiones muy distantes en el espacio fásico. Ya que este fenómeno se asemeja a la difusión de partículas, fue bautizado posteriormente como *difusión de Arnold* [7].

1.2.3. Secciones de Poincaré

Visualizar y estudiar las soluciones de un SDO de dimensión mayor que 3 es imposible. Para sistemas hamiltonianos, solamente aquellos que presenten un grado de libertad gozan de esta cualidad. Es por ello que trabajar con la proyección o intersección de las órbitas con una determinada subvariedad del espacio fásico nos puede ser de gran ayuda a la hora de analizar el comportamiento de un sistema dinámico concreto.

Consideremos un SDO $y' = f(y)$ análogo al de (1.28) pero autónomo, compuesto por n ecuaciones diferenciales. Se conoce como *sección de Poincaré* al conjunto de puntos resultantes de la intersección de una determinada trayectoria con una $(n-1)$ -subvariedad del espacio de trabajo¹⁸, *siempre en el mismo sentido de avance*. Por ejemplo, si la subvariedad escogida es el hiperplano $y_n = y_{n0}$, la sección de Poincaré la conformarán aquellos puntos de corte de la trayectoria con dicho hiperplano cuando esta avanza desde $y_n < y_{n0}$ hasta $y_n > y_{n0}$.

Esta construcción tiene asociado de forma natural un mapa discreto: el *mapa de Poincaré II*,

¹⁷Entenderemos que algo ocurre *casi nunca* o *casi siempre* cuando ocurre para toda condición excepto para un subconjunto de medida nula.

¹⁸Hay textos que consideran que la subvariedad base puede ser de cualquier dimensión (por ejemplo, [15]), aunque no será nuestro caso.

que asigna el punto de intersección $P^{(t)} = (y_1^{(t)}, \dots, y_n^{(t)})$ al siguiente punto $P^{(t+1)} = (y_1^{(t+1)}, \dots, y_n^{(t+1)})$ a lo largo de la evolución temporal del sistema. La condición inicial del SDO suele escogerse de tal modo que pertenezca a la subvariedad en cuestión, teniéndose que $P^{(0)} = y(0)$.

Para SDOs de tres dimensiones (o sistemas conservativos de dos grados de libertad), la sección de Poincaré habitará en una subvariedad bidimensional¹⁹. En estos casos, podremos determinar fácilmente el tipo de trayectoria a partir del análisis cualitativo de su sección de Poincaré asociada [15]:

- Si la trayectoria es periódica, la sección de Poincaré consistirá en un conjunto finito y discreto de puntos.
- Si es cuasiperiódica, formará una curva cerrada en la subvariedad.
- Si es caótica, su forma será algo más complicada. En presencia de atractores, esta consistirá en un conjunto de puntos de dimensión usualmente fractal. Para sistemas hamiltonianos, esta tenderá a rellenar todo el espacio accesible.

Aunque no siempre es sencillo construir la sección de Poincaré de un sistema dinámico, así como tampoco existen métodos generales para construirla, en los casos en que es posible es de gran ayuda, ya que reduce en una unidad las dimensiones del problema.

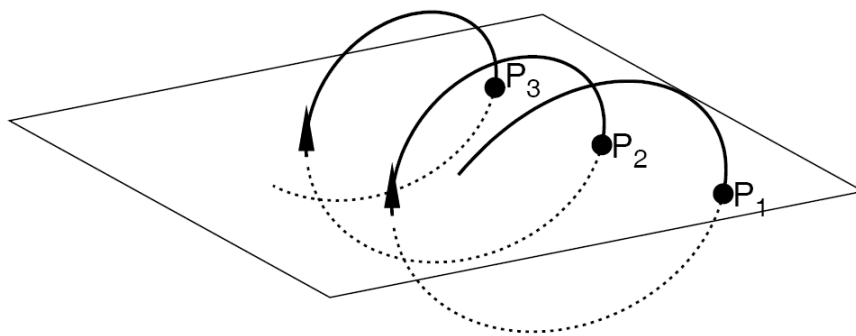


Figura 1.3: Sección de Poincaré de una trayectoria genérica, eligiendo como subvariedad base un hiperplano. Tomada de [7]

1.2.4. El Teorema Kolmogorov-Arnold-Moser

Como hemos comentado en las secciones anteriores, el espacio fásico de los sistemas integrables queda relleno, “foliado”, por toros \mathbb{T}^n cuyos radios vendrán marcados por los valores de las n variables acción I . En la sección anterior (ecuación (1.36)) vimos que una perturbación,

¹⁹En el caso de sistemas hamiltonianos, la órbita del sistema discurre por la SEC, que es de dimensión $n - 1$. Si se elige adecuadamente la subvariedad base para construir la sección de Poincaré (por ejemplo, que la SEC y dicha subvariedad sean secantes), esta habitará en una subvariedad de dimensión $n - 2$.

por pequeña que sea, destruye esas n integrales primeras, y en particular aquellos toros que son resonantes (caracterizados por frecuencias conmensurables) acaban siendo aniquilados.

Recordamos que aquellos valores de \mathbf{I} que se corresponden con toros resonantes forman un subconjunto denso (y de medida nula) en el espacio fásico. Es decir, la probabilidad de elegir unas condiciones iniciales correspondientes a un toro resonante es nula con la medida de Lebesgue. Por tanto, parece lógico pensar que si aplicamos una perturbación pequeña a una hamiltoniana integrable, sea bastante improbable que todos los toros se destruyan por acción de la misma. Esto es precisamente lo que afirma el Teorema Kolmogorov-Arnold-Moser (Teorema KAM a partir de ahora) cuando nuestro sistema es no degenerado [1]:

Teorema 3 (Kolmogorov-Arnold-Moser). *Consideremos un sistema con hamiltoniana $\mathcal{H}_0(\mathbf{I})$ integrable y no degenerado (condición (1.25)). Si se introduce una perturbación a la misma de la forma*

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\phi}, \mathbf{I}) = \mathcal{H}_0(\mathbf{I}) + \varepsilon \mathcal{H}_1(\boldsymbol{\phi}, \mathbf{I})$$

la probabilidad de escoger unas condiciones iniciales correspondientes a un toro no resonante que no ha sido destruido por la perturbación tiende a 1 cuando $\varepsilon \rightarrow 0$. Estos toros son ligeramente deformados por la acción de dicha perturbación.

Los toros ligeramente deformados a los que se refiere el teorema se conocen como *toros KAM*. Expondremos a continuación las ideas básicas de la prueba [7, 15]. Primeramente, la hipótesis de no degeneración (1.25) es importante en la demostración del teorema para poder etiquetar a los toros del sistema no perturbado equivalentemente por su valor de la variable acción o por la frecuencia asociada. Además, por la continuidad del determinante, dicha condición se mantendrá para pequeñas perturbaciones de la hamiltoniana original, por lo que los toros KAM podrán seguir siendo etiquetados tanto por sus frecuencias como por los valores de las variables acción.

Ya que lo que intentamos probar es que la mayoría de los toros sobreviven a la perturbación, parece lógico intentar construir una transformación canónica que convierta las variables acción-ángulo $(\mathbf{I}, \boldsymbol{\phi})$ del sistema no perturbado en otro conjunto de variables $(\mathbf{I}', \boldsymbol{\phi}')$ tales que $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{I}')$. Para ello, podría hacerse uso de la teoría de perturbaciones canónica (véase [15]), proponiendo una función generatriz desarrollada en potencias de ε .

Sin embargo, dicho desarrollo no puede converger a una función generatriz de una transformación canónica. En efecto, si así fuera el sistema perturbado sería integrable, al haber proporcionado un nuevo conjunto de variables acción, pero precisamente esto no puede ocurrir según mostramos en el desarrollo (1.36) y su posterior discusión. La novedad que introduce la prueba del Teorema KAM es que propone un desarrollo perturbativo *local*, válido en un entorno de una frecuencia fija de antemano ω_0 , el cual se caracteriza por ser *superconvergente* en ε .

A lo largo del método nos aparecerán series similares a (1.36), con el problema de los denomi-

nadores pequeños. Para asegurar su convergencia, debemos asegurar tanto que los numeradores de cada sumando decrezcan suficientemente rápido conforme los $m_j \in \mathbb{Z}$ aumenten, así como que los denominadores no decrezcan demasiado. Esto último puede controlarse gracias a la *desigualdad diofántica*, satisfecha por casi todo vector de frecuencias $\omega_0 \in \mathbb{R}^n$:

$$|\mathbf{m} \cdot \omega_0| > \alpha(\omega_0)(|m_1| + \dots + |m_n|)^{-\tau} \quad (1.37)$$

con $\alpha > 0$ cierta constante, para todo $\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^n \setminus \{0\}$ y $\tau > n-1$. El valor de α depende también del parámetro perturbativo ε : cuanto mayor sea dicho parámetro, dejaremos fuera una mayor cantidad de frecuencias hasta el punto de no quedarnos con ninguna. Por contra, en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ dicha desigualdad solamente descartará aquellas frecuencias que sean conmensurables.

Una vez hemos asegurado que los denominadores se mantienen acotados, el siguiente paso consiste en poner en marcha el citado desarrollo perturbativo local. En un primer paso, se subdivide la parte perturbativa \mathcal{H}_1 de la hamiltoniana completa en dos sumandos, haciendo que uno de los cuales sea de orden $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$. Mediante una transformación canónica válida en un entorno de la frecuencia ω_0 elegida, podemos conseguir anular el otro sumando. Si repetimos el proceso anterior para el término superviviente, al separarlo de nuevo en dos sumandos uno de ellos será de orden $(\varepsilon^2)^2$. De este modo, en cada paso k conseguimos que los términos obtenidos sean del orden de ε^{2^k} , por lo que el método convergerá mucho más rápido que otros desarrollos perturbativos²⁰. Por tanto, podremos construir *localmente* las integrales primeras F_j de (1.30) y desarrollos similares en un conjunto de medida no nula, que excluya aquellas frecuencias asociadas a toros resonantes.

A pesar de que el carácter integrable del sistema se pierde a causa de la perturbación, *casi todos* los toros sí que sobreviven a su efecto. El motivo oculto tras la desigualdad diofántica (1.37) radica fundamentalmente en que hay muchos más números irracionales que racionales en \mathbb{R}^n (estos últimos tienen medida de Lebesgue nula en \mathbb{R}^n), por lo que aquellas frecuencias para las que los sumandos de (1.36) divergen son mucho menores en cantidad que para las que no divergen. El “grado de irracionalidad” de las frecuencias asociadas a cada toro será clave para determinar la magnitud de la deformación de los mismos.

Cuando el sistema presenta uno o dos grados de libertad, cada uno de los toros separa en dos regiones disjuntas la SEC (véase la figura 1.4). Por tanto, los toros KAM servirán de barrera entre los diferentes *mares caóticos* que emergerán en el espacio fásico conforme la perturbación se haga más y más intensa [7]. Estos mares provienen de toros destruidos, “desgranados”, que tenderán a cubrir regiones de medida no nula del espacio fásico accesible.

²⁰Una herramienta usada en la prueba del teorema es el método de Newton para encontrar ceros de funciones (hemos visto que el razonamiento seguido exige anular un conjunto de funciones). Dicho método se caracteriza por converger superlinealmente (o *superconverger*), cualidad que está detrás de la superconvergencia del método perturbativo de la demostración.

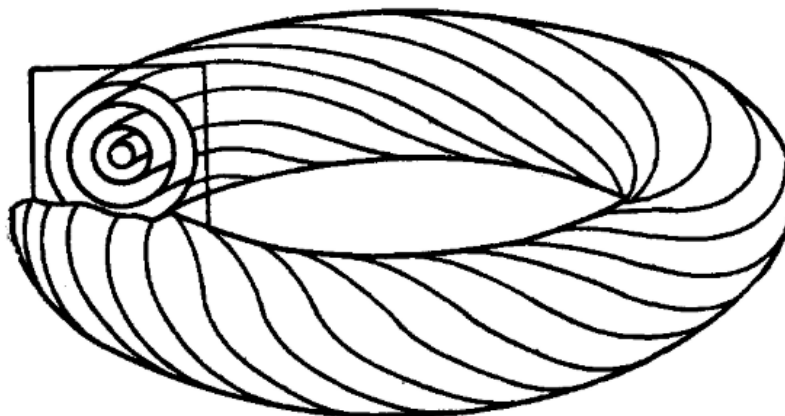


Figura 1.4: Una familia de toros habitando en la SEC de dimensión 3. Tomado de [29]

Por último, notemos que el Teorema KAM aborda la “eternidad” de los toros supervivientes. Es decir, aquellos toros que dicho teorema considera que sobreviven lo hacen por un tiempo infinito, fijada la intensidad de la perturbación. Existen resultados (como el Teorema de Nekhoroshev, véase [7]) que nos aportan cotas sobre aquellos toros que solamente permanecen sin ser destruidos por un tiempo finito (aunque arbitrariamente grande).

El Teorema KAM para sistemas degenerados

El modelo que estudiaremos en este trabajo es una perturbación del oscilador armónico, por lo que el Teorema KAM no es estrictamente aplicable (puede comprobarse que la condición (1.25) no se cumple en este caso). Sin embargo, bajo ciertas condiciones puede rescatarse una desigualdad diofántica similar a (1.37) y probar un resultado análogo al citado teorema.

Vamos a exponer el razonamiento para un sistema de $n = 2$ grados de libertad. Supongamos que la hamiltoniana de nuestro sistema es de la forma:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2 + \omega_1^2 q_1^2 + \omega_2^2 q_2^2) + \varepsilon \mathcal{H}_{pert}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \quad (1.38)$$

con ε un parámetro pequeño. Debemos notar que el origen de coordenadas es un punto de equilibrio estable del oscilador armónico. Si la expresamos en las variables acción-ángulo del sistema sin perturbar, la hamiltoniana anterior adquirirá la forma:

$$\mathcal{H}(\mathbf{I}, \boldsymbol{\phi}) = \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{I} + \varepsilon \mathcal{H}_{pert}(\mathbf{I}, \boldsymbol{\omega}) \quad (1.39)$$

con $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \omega_2)$, como viene siendo usual. Puede probarse [29] que si

$$\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{m} \neq 0, \quad \forall \mathbf{m} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{(0, 0)\} \quad \text{con} \quad |m_1| + |m_2| \leq 4 \quad (1.40)$$

existe una transformación canónica $(\mathbf{q}', \mathbf{p}')$ que reexpresa \mathcal{H}_{pert} como una serie de potencias convergente de q'_j y p'_j cumpliendo que $\mathcal{H}_{pert} = \mathcal{O}(|\mathbf{I}|^{5/2})$. Dicha serie de potencias será válida para puntos cercanos al equilibrio estable. El procedimiento para construir dicha serie es mediante la teoría de perturbaciones, construyendo de nuevo la transformación como un desarrollo en potencias de ε e intentando deshacerse de aquellos términos que presenten denominadores pequeños.

Bajo el amparo del resultado anterior, puede deducirse también [29] que la desigualdad (1.37) se cumple para $\tau = 3$ en un entorno del origen de coordenadas. De este modo, bajo pequeñas perturbaciones (que permiten que las coordenadas del espacio fásico se mantengan cercanas al origen) conseguimos demostrar que *casi todos* los toros asociados al oscilador armónico sobreviven, tal y como indica el Teorema KAM original.

1.2.5. El destino de los toros resonantes

El Teorema KAM predice el destino de casi todos los toros que habitan en el espacio fásico del sistema imperturbado. Estos, cuando la intensidad de la perturbación es suficientemente pequeña, sólo serán ligeramente deformados bajo su acción. Además, la perturbación comenzará por destruir aquellos toros correspondientes a frecuencias conmensurables. Conforme la perturbación se hace más intensa, más y más toros serán destruidos, también aquellos con frecuencias asociadas no conmensurables.

En ausencia de perturbación, los toros resonantes son invariantes ante el mapa de Poincaré \mathbf{II} . Es decir, tras un número finito de iteraciones de dicho mapa todo punto sobre uno de ellos vuelve a su posición inicial (esto es debido a que el cociente entre las frecuencias es un número racional [21, 7]). Existen resultados que describen con detalle qué les ocurre a estos toros bajo la acción de una perturbación. Una aplicación del Teorema de Poincaré-Birkhoff nos permite afirmar que, para una sección de Poincaré correspondiente a un sistema de dos grados de libertad, los toros resonantes pasan a convertirse en un número par de puntos fijos por \mathbf{II} , la mitad de los cuales estables y la otra mitad inestables (véase [21, 7, 15] para una explicación detallada).

En torno a los puntos fijos estables aparecerán secciones de Poincaré en forma de curvas cerradas, rodeando a dichos puntos fijos. A su vez, también aparecerán a su alrededor nuevos puntos fijos estables conforme la perturbación destruya otros toros cercanos. Este proceso se repetirá *ad infinitum*, generando patrones de autosimilitud y fractales como los que trataremos en la sección 3.2.2 [21]. La estructura que observaremos será de curvas cerradas, rodeando a su vez a otras curvas cerradas, por lo que estas se suelen denominar *cadena de islas regulares*.

En otras ocasiones, podremos encontrarnos con secciones de Poincaré formando curvas cerradas que sufren autointersecciones. Estas curvas se conocen con el nombre de *separatrices*, debido a que separan ciertas regiones del diagrama. Normalmente las separatrices unen pun-

tos fijos inestables del mapa **II**. En torno a dichas autointersecciones, el comportamiento de las secciones vecinas se complica, y es justo en esas zonas donde surge el caos en sistemas hamiltonianos [21].

1.3. Modelo de Hénon-Heiles

El objetivo fundamental este trabajo es el estudio numérico del modelo de Hénon-Heiles, por lo que para terminar con el fundamento teórico introduciremos brevemente dicho modelo y sus características más destacadas.

Hénon y Heiles se propusieron estudiar la existencia de nuevas integrales primeras en un problema de dinámica celeste, suponiendo que el potencial que entraba en juego tenía simetría de revolución en torno a un cierto eje. Como bien es conocido, la energía y el momento angular son dos integrales primeras para este tipo de problemas. En su artículo [14], expusieron los resultados obtenidos tras buscar numéricamente la existencia de nuevas integrales para el problema considerado.

El potencial al que llegaron, tras una serie de razonamientos y adimensionalizando las variables, tiene la forma:

$$V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + x^2y - \frac{1}{3}y^3 \quad (1.41)$$

por lo que la hamiltoniana asociada a dicho modelo resulta:

$$\mathcal{H}(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + x^2y - \frac{1}{3}y^3 \quad (1.42)$$

donde, en principio, el espacio fásico coincide con $\mathbb{R}^4 = \Sigma$. La hamiltoniana (1.42) puede entenderse como una perturbación de la correspondiente a un oscilador armónico bidimensional. Para mostrar este hecho, apliquemos el siguiente escalado a las variables de nuestro problema:

$$x \mapsto X = \frac{x}{\sqrt{E_0}} \quad y \mapsto Y = \frac{y}{\sqrt{E_0}} \quad p_x \mapsto P_x = \frac{p_x}{\sqrt{E_0}} \quad p_y \mapsto P_y = \frac{p_y}{\sqrt{E_0}} \quad (1.43)$$

donde E_0 es un parámetro del orden de la escala de energías del sistema. Introduciendo estas nuevas variables en (1.42):

$$\mathcal{H}' = \frac{1}{2}(P_x^2 + P_y^2) + \frac{1}{2}(X^2 + Y^2) + \sqrt{E_0} \left(X^2Y - \frac{1}{3}Y^3 \right) \equiv \frac{E}{E_0} \quad (1.44)$$

Podemos observar que, eligiendo una escala adecuada, la hamiltoniana del sistema resulta ser una perturbación del oscilador armónico, siendo $\sqrt{E_0}$ el parámetro perturbativo. Además,

a partir del razonamiento anterior concluimos que es equivalente trabajar con (1.44) a trabajar con la hamiltoniana original, considerando en este último caso a la escala de energía total como parámetro perturbativo. Para valores suficientemente pequeños de $\sqrt{E_0}$, la versión del Teorema KAM para sistemas degenerados será aplicable y conseguiremos mantenernos cerca del equilibrio estable del sistema no perturbado.

Estudiamos de forma concisa los valores regulares de \mathcal{H} en (1.42). Para ello, buscaremos aquellos puntos donde $d\mathcal{H}$ no sea sobreyectiva; en este caso, basta con encontrar aquellos puntos donde esta se anula.

$$d\mathcal{H} = (x + 2xy) dx + (y + x^2 - y^2) dy + p_x dp_x + p_y dp_y = 0 \quad (1.45)$$

Las soluciones del sistema de ecuaciones resultante son:

$$(x, y, p_x, p_y) = (0, 0, 0, 0) \quad (x, y, p_x, p_y) = (0, 1, 0, 0) \quad (1.46)$$

con energías asociadas $E = 0$ y $E = 1/6$, respectivamente. Por lo tanto, para valores de la energía distintos de los anteriores, $d\mathcal{H}$ es sobreyectiva y $\mathcal{H} \equiv E$ constituye una subvariedad dentro de Σ . De hecho, el valor $E_{esc} = 1/6$ determina un límite para las trayectorias acotadas del sistema (energía de escape) [14]. Nosotros limitaremos nuestro estudio a valores de la energía inferiores a la energía de escape, para los que la región del espacio fásico accesible por el sistema es limitada.

Las ecuaciones canónicas de movimiento resultan ser, aplicando (1.2):

$$\begin{cases} \dot{x} = p_x \\ \dot{y} = p_y \\ \dot{p}_x = -x - 2xy \\ \dot{p}_y = -y - x^2 + y^2 \end{cases} \quad (1.47)$$

Mostramos en la tabla 1.1 los puntos críticos del anterior sistema diferencial, así como su estabilidad.

$(x_0, y_0, p_{x0}, p_{y0})$	Estabilidad
$(0, 0, 0, 0)$	Estable
$(0, 1, 0, 0)$	Punto silla
$(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0, 0)$	Punto silla
$(-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0, 0)$	Punto silla

Tabla 1.1: Puntos críticos del sistema (1.47) y su estabilidad

Los tres últimos puntos presentan direcciones atractivas y repulsivas, respectivamente, y se corresponden con los tres vértices del triángulo azul de la figura 1.5. La estabilidad del origen de coordenadas también puede deducirse recordando que el sistema puede entenderse como una perturbación del oscilador armónico, para el cual sabemos que dicho punto es estable.

Estudiamos para terminar la forma de las líneas equipotenciales de $V(x, y)$, sobre las cuales la velocidad de la partícula debe ser nula (es decir, nos limitan la región del espacio físico accesible por el sistema para cada valor de la energía). Mostramos dichas curvas en la figura 1.5.

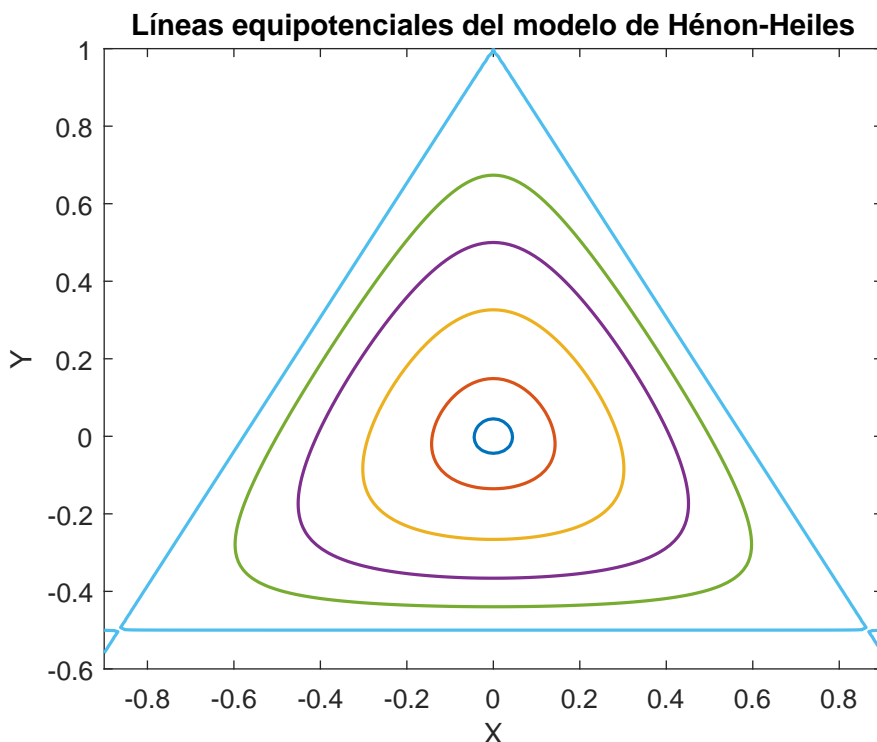


Figura 1.5: Líneas equipotenciales del potencial de Hénon-Heiles para $E = 1/1000, 1/100, 1/24, 1/12, 1/8, 1/6$

Para valores bajos de la energía, las curvas son aproximadamente circulares (como corresponde para el oscilador armónico de frecuencia $\omega = 1$). En virtud del Teorema KAM, para estos valores de E no esperamos que el caos sea especialmente notable. El valor $V(x, y) = 1/6 = E_{esc}$ proporciona una curva triangular, lo que también nos permite entender por qué dicho valor no es regular para la hamiltoniana (la curva presenta picos, los cuales no son diferenciables). Conforme el valor de E va aumentando, las curvas se van aproximando a dicho triángulo y el caos irá rellenando el espacio físico.

Esperamos también que las peculiaridades del caos hamiltoniano comentadas en secciones anteriores estén presentes en dicho modelo. En especial destacamos que la difusión de Arnold no se manifestará, al tener que $n \leq 2$.

Capítulo 2

Metodología

En este capítulo, introduciremos y describiremos con detalle todos los métodos y algoritmos que utilizaremos en nuestro análisis numérico posterior. Este punto es de vital importancia para nuestro trabajo, ya que como comentaremos posteriormente los esquemas numéricos normalmente empleados rompen la estructura natural del espacio fásico, lo cual constituye un problema importante en el estudio del caos.

En segundo lugar, definiremos aquellos indicadores cuantitativos que nos permitirán determinar si una determinada órbita presenta o no un carácter caótico.

2.1. Integradores simplécticos

2.1.1. Introducción

Comencemos definiendo lo que entenderemos por *integrador*, concepto fundamental para la resolución numérica de la dinámica de un determinado sistema [20].

Definición 2. Dado un SDO como el de (1.28), diremos que un mapa

$$\phi(k, \cdot) : M \rightarrow M$$

es un **integrador** de paso temporal $k \in \mathbb{R}$ si $\phi(0, y) = y$ y además $\phi(k, y^{(m)}) = y^{(m+1)} = \phi^{m+1}(k, y_0)$, donde $\phi^m(k, \cdot)$ indica la iteración m -ésima del mapa e $y_0 = y^{(0)}$ la condición inicial.

Nos referiremos por **orden del integrador** a la “cercanía” (en un sentido que se precisará en cada caso concreto) de la solución exacta del SDO a la solución proporcionada por el algoritmo.

Nótese el parecido con el mapa de evolución temporal, Definición 1. La definición introducida

en este capítulo es válida, por contra, para cualquier sistema diferencial. Mediante aplicaciones reiteradas, el integrador tiene por objetivo resolver de forma aproximada un SDO dado, siendo dicha aproximación mejor cuanto menor es el paso temporal k (en el límite $k \rightarrow 0$, ϕ coincidirá con el flujo continuo asociado al sistema diferencial considerado).

Los algoritmos más empleados actualmente para resolver la mayoría de sistemas diferenciales son esquemas de Runge-Kutta (RK)¹. Aunque gozan en general de bastante precisión, estos métodos presentan el grave problema de no preservar la estructura natural del espacio fásico para sistemas hamiltonianos. Por ejemplo, como comprobaremos posteriormente en el modelo que estudiaremos, la solución proporcionada por un método RK **no mantiene constante la energía del sistema**, a pesar de que este es conservativo. Además de ser un problema de tipo conceptual, también lo es de tipo numérico en el objeto del presente trabajo, ya que no tendremos certezas de si el aparente caos observado en las soluciones obtenidas se debe al algoritmo empleado o es el inherente al sistema.

En consecuencia, nos vemos obligados a utilizar otros métodos numéricos diferentes que respeten el carácter simpléctico de la variedad fásica. Estos algoritmos se conocen como *integradores simplécticos*², y serán los que implementaremos posteriormente para estudiar la dinámica del modelo de Hénon-Heiles.

Un algoritmo simpléctico muy utilizado en dinámica molecular es el conocido como *algoritmo de Verlet* [23, 13]. Existen varias versiones del mismo, todas ellas equivalentes. Aunque las ecuaciones del esquema se obtienen a partir de un desarrollo en serie de Taylor de las coordenadas, también pueden entenderse como una aproximación a la ecuación de evolución temporal de una función dinámica cualquiera. Esto último confiere al algoritmo la cualidad de integrador simpléctico, y mostramos una justificación detallada en el Anexo I.

El algoritmo de Verlet de paso temporal k para integrar numéricamente las ecuaciones de movimiento asociadas a una hamiltoniana de la forma $\mathcal{H} = \sum_{j=1}^n \frac{p_j^2}{2m_j} + V(\mathbf{q})$ se define de la siguiente forma:

¹Una prueba de ello es que los comandos más conocidos de MATLAB para resolver sistemas diferenciales (la familia de comandos odeN) utilizan esquemas Runge-Kutta mejorados.

²Formalmente, un mapa discreto $(\mathbf{q}_n, \mathbf{p}_n) \xrightarrow{\phi_k} (\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{p}_{n+1})$ se dice simpléctico si su matriz jacobiana respecto a las variables $q_j, p_j, \mathbf{J}_\phi(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, satisface una condición similar a la del Teorema 2:

$$\mathbf{J}_\phi^T \mathbf{S} \mathbf{J}_\phi = \mathbf{S}$$

para todo $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in \Sigma$ y todo paso de tiempo k .

$$\begin{cases} q_j^{(m+1)} = q_j^{(m)} + \frac{p_j^{(m)}}{m_j}k + \frac{F_j(\mathbf{q}^{(m)})}{2m_j}k^2 \\ p_j^{(m+1)} = p_j^{(m)} + \frac{F_j(\mathbf{q}^{(m+1)}) + F_j(\mathbf{q}^{(m)})}{2}k \end{cases} \quad (2.1)$$

donde por $(\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m)})$ denotamos la iteración m -ésima del algoritmo. Además del algoritmo de Verlet, dentro de los integradores simplécticos nos encontramos también con otras formas de abordar su construcción. Por ejemplo, podemos diseñar una transformación canónica adecuada, la cual sabemos que respeta toda la estructura del fibrado cotangente. De entre dichas transformaciones, la que más se asemeja a la idea de integrador es la evolución temporal, por lo que los enfoques que mostraremos a partir de ahora irán centrados en aprovechar las diferentes cualidades que posee dicha transformación.

Una de las familias de algoritmos simplécticos actualmente desarrolladas se basa en la obtención de una solución aproximada de la ecuación de Hamilton-Jacobi (véase la sección 1.1.3). Para ello, se propone que la acción \mathcal{S} pueda desarrollarse perturbativamente en potencias de un determinado “parámetro artificial” ε . A partir de las ecuaciones de transformación (1.10) y siguiendo las técnicas de la teoría de perturbaciones canónica, las coordenadas “nuevas” se corresponderán con la $(m+1)$ -ésima iteración del algoritmo, a partir de las coordenadas “antiguas” correspondientes al paso anterior. Esta línea de razonamiento es la que se sigue en la referencia [8]

Por otra parte, notando que para pasos de tiempo suficientemente pequeños un integrador se comportará como el mapa de evolución temporal infinitesimal (véase la sección 1.1.2), podemos construir otra familia de integradores simplécticos inspirándonos en dicha TCI. Este será el enfoque que seguiremos a partir de ahora, tomado de la referencia [20].

2.1.2. Esquemas de Runge-Kutta simplécticos

En el primer capítulo introdujimos las TCI. Como ya comentamos, estas tienen asociada una función generatriz de la forma:

$$\Phi(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) = \sum_{j=1}^n q_j P_j + \varepsilon G(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) \quad (2.2)$$

con ε un parámetro infinitesimalmente pequeño. La relación entre las coordenadas antiguas (\mathbf{q}, \mathbf{p}) y las nuevas (\mathbf{Q}, \mathbf{P}) viene dada por el conjunto de ecuaciones (1.16), que a primer orden en ε resultan:

$$Q_j = q_j + \varepsilon \frac{\partial G(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial p_j} \quad P_j = p_j - \varepsilon \frac{\partial G(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial q_j} \quad (2.3)$$

Cuando ε deja de ser un parámetro infinitesimal aunque aún pequeño, es más preciso utilizar las ecuaciones de transformación generales (1.10) y considerar que G depende efectivamente de \mathbf{P} . Las expresiones (2.3) resultan, bajo esta suposición:

$$Q_j = q_j + \varepsilon \frac{\partial G(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t)}{\partial P_j} \quad P_j = p_j - \varepsilon \frac{\partial G(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t)}{\partial q_j} \quad (2.4)$$

Tomando $\varepsilon = k$ como nuestro paso de tiempo y $G = \mathcal{H}$, la transformación canónica anterior será una primera candidata a integrador de nuestro sistema hamiltoniano. Las coordenadas “antiguas” se corresponderán con la iteración m -ésima y las “nuevas” con la iteración $(m + 1)$ -ésima del algoritmo.

Podemos, además, modificar el esquema anterior siguiendo la idea de los métodos RK ordinarios mediante la introducción de pasos intermedios en la integración. Es decir, entre la iteración m -ésima y la $(m + 1)$ -ésima del algoritmo, podemos realizar un total de ℓ cálculos intermedios, cada uno de los cuales caracterizado por la función generatriz:

$$\Phi_\alpha = \mathbf{q}_{\alpha-1} \cdot \mathbf{p}_\alpha + k\mathcal{H}_\alpha(\mathbf{q}_{\alpha-1}, \mathbf{p}_\alpha), \quad \forall \alpha = 1, \dots, \ell \quad (2.5)$$

siendo $(\mathbf{q}_\alpha, \mathbf{p}_\alpha)$ el α -ésimo cálculo intermedio y \mathcal{H}_α una hamiltoniana convenientemente “aproximada”, según veremos a continuación. Por último, si suponemos que nuestra hamiltoniana tiene la forma típica $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$, podemos introducir un conjunto de parámetros de ajuste a_α, b_α en cada paso intermedio:

$$\Phi_\alpha = \mathbf{q}_{\alpha-1} \cdot \mathbf{p}_\alpha + k(a_\alpha T(\mathbf{p}_\alpha) + b_\alpha V(\mathbf{q}_{\alpha-1})), \quad \forall \alpha = 1, \dots, \ell \quad (2.6)$$

Estos parámetros nos servirán, como veremos más adelante, para controlar el orden del método y el error introducido por el mismo. La función generatriz (2.6) sigue correspondiéndose con la de una TCI (más concretamente con la evolución temporal infinitesimal, ya que k es un paso de tiempo). Sin embargo, la “nueva hamiltoniana”

$$(a_\alpha T(\mathbf{p}_\alpha) + b_\alpha V(\mathbf{q}_{\alpha-1})) \quad (2.7)$$

no es exactamente la misma que la de nuestro sistema. Podemos entenderla, como adelantamos algunas líneas más arriba, como una hamiltoniana aproximada, que generará *en cada paso intermedio* nuestro integrador numérico³.

Con todo ello, las ecuaciones del integrador resultante $\phi(k, \cdot)$ en cada paso intermedio $\alpha \in$

³Es esta la interpretación que se da, de hecho, en la referencia [20].

$\{1, \dots, \ell\}$ resultan, a partir de (2.4):

$$\mathbf{p}_\alpha = \mathbf{p}_{\alpha-1} - kb_\alpha \nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}_{\alpha-1}) = \dots = \mathbf{p}_0 - k \sum_{\beta=1}^{\alpha} b_\beta \nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}_{\beta-1}) \quad (2.8)$$

$$\mathbf{q}_\alpha = \mathbf{q}_{\alpha-1} + ka_\alpha \nabla_{\mathbf{p}} T(\mathbf{p}_\alpha) = \dots = \mathbf{q}_0 + k \sum_{\beta=1}^{\alpha} a_\beta \nabla_{\mathbf{p}} T(\mathbf{p}_\beta) \quad (2.9)$$

El método, por tanto, parte de la iteración m -ésima $(\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m)}) =: (\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)$ (con $\alpha = 0$) y tras ℓ cálculos intermedios llega hasta $(\mathbf{q}_\ell, \mathbf{p}_\ell)$, que haremos corresponder con la iteración $(m+1)$ -ésima del integrador, $(\mathbf{q}_\ell, \mathbf{p}_\ell) =: (\mathbf{q}^{(m+1)}, \mathbf{p}^{(m+1)})$. Este último punto servirá de punto de partida para la iteración siguiente.

Los 2ℓ parámetros introducidos “artificialmente” son los que nos permitirán determinar el orden del integrador que acabamos de construir. En el paso $\alpha = \ell$, la hamiltoniana del sistema valdrá $\mathcal{H}(\mathbf{q}_\ell, \mathbf{p}_\ell)$. Por otro lado, según comentamos anteriormente, por identificación podemos interpretar la suma

$$\mathcal{H}_{aprox} = \sum_{\alpha=1}^{\ell} [a_\alpha T(\mathbf{p}_\alpha) + b_\alpha V(\mathbf{q}_{\alpha-1})] \quad (2.10)$$

como una hamiltoniana aproximada que genera nuestro algoritmo simpléctico. Por lo tanto, atendiendo a la Definición 2, diremos que el integrador ϕ es de orden p si:

$$\mathcal{H} - \mathcal{H}_{aprox} = \mathcal{O}(k^p) \quad (2.11)$$

Suponiendo que T y V tienen regularidad suficiente, podemos desarrollar en serie de potencias de t la diferencia anterior:

$$\mathcal{H} - \mathcal{H}_{aprox} = \sum_{m \geq 0} h_m(\mathbf{q}, \mathbf{p}) t^m \quad (2.12)$$

Para que el algoritmo sea de orden p , forzaremos a que $h_m \equiv 0$, para todo $m = 0, \dots, p-1$. A partir de estas condiciones, obtendremos un conjunto de p ecuaciones para a_α y b_α que restringirán sus posibles valores. El resto de condiciones vendrán impuestas por que el error de truncamiento (caracterizado por el término h_p) tenga por parámetros a_α y b_α aquellos que lo minimicen en una determinada norma. En la referencia [20, Tb. 2] pueden encontrarse distintas elecciones de los parámetros de ajuste para diseñar un método de orden p con un determinado criterio de minimización. Nosotros hemos elegido minimizar dicho error en la norma cuadrática, lo que conlleva a la elección de los parámetros que mostramos en la tabla 2.1 para construir un esquema de orden $p = 3$:

a_1	0,919661523017400
a_2	$\frac{1}{4a_1} - \frac{a_1}{2} = -0,187991618799160$
a_3	$1 - a_1 - a_2 = 0,268330095781760$
b_j	$a_{4-j} \ (j = 1, 2, 3)$

Tabla 2.1: Parámetros del integrador simpléctico que utilizaremos para el estudio de nuestro sistema. Estos permiten construir un esquema de orden 3 que minimiza el error en norma cuadrática

El algoritmo que hemos desarrollado en esta sección se enmarca dentro de los conocidos como *algoritmos de Runge-Kutta simplécticos*. Para un estudio más formal y riguroso de los mismos, pueden consultarse las referencias [24, 25]. Mostramos, a modo de resumen, un esquema del proceso algorítmico:

Iteración m , paso de tiempo k :

1. Hacemos $(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) := (\mathbf{p}^{(m)}, \mathbf{q}^{(m)})$.

2. Para $\alpha = 1, \dots, \ell$ y $j = 1, \dots, n$:

$$p_{\alpha j} = p_{\alpha-1, j} - kb_{\alpha} \left. \frac{\partial V}{\partial q_j} \right|_{(q_{\alpha-1,1}, \dots, q_{\alpha-1, n})}$$

$$q_{\alpha j} = q_{\alpha-1, j} + ka_{\alpha} \left. \frac{\partial T}{\partial p_j} \right|_{(p_{\alpha 1}, \dots, p_{\alpha n})}$$

3. Hacemos $(\mathbf{p}^{(m+1)}, \mathbf{q}^{(m+1)}) := (\mathbf{p}_{\ell}, \mathbf{q}_{\ell})$. Hacemos $(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) := (\mathbf{p}^{(m+1)}, \mathbf{q}^{(m+1)})$ y volvemos al paso 2.

2.2. Indicadores numéricos del caos

Ya señalamos en secciones anteriores que no existe una definición precisa de lo que se entiende por caos, sino que es la manifestación de sus principales indicadores la que nos permite afirmar que este se encuentra presente en nuestra dinámica. En esta sección, introduciremos algunos de estos indicadores numéricos, que nos permitirán determinar el carácter caótico de las órbitas estudiadas.

2.2.1. Exponentes de Lyapunov

Uno de los marcadores más utilizados para mostrar la fuerte dependencia de las condiciones iniciales son los *exponentes de Lyapunov* [7]. Consideremos de nuevo el SDO genérico (1.28) pero en su versión autónoma, donde los puntos $y(t)$ discurren por una determinada variedad M . Para estudiar cómo de sensible es la dinámica a cambios en las condiciones iniciales, podemos seguir la evolución temporal de una desviación infinitesimal entre dos puntos arbitrarios de M :

$$\Delta y(0) := y(0) - \hat{y}(0) \quad (2.13)$$

con $\|\Delta y(0)\|$ suficientemente pequeño. En sistemas no caóticos, esta diferencia o bien se mantiene acotada o bien aumenta polinómicamente [7]. Sin embargo, en sistemas caóticos dicho aumento es **exponencial**:

$$\Delta y(t) \sim \Delta y(0)e^{\gamma t} \quad (2.14)$$

donde $\gamma = \gamma(y(0), t)$ puede entenderse como la *tasa local de expansión* de la desviación inicial conforme avanza el tiempo [7]. Por lo tanto, cuando el siguiente límite exista⁴:

$$\Lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\lim_{\Delta y(0) \rightarrow 0} \frac{1}{t} \log \frac{\Delta y(t)}{\Delta y(0)} \right] \quad (2.15)$$

este podrá interpretarse como un parámetro que caracteriza a la órbita correspondiente a la condición inicial escogida. Dicho límite se conoce como (*máximo*) *exponente de Lyapunov*. Si $\Lambda > 0$, diremos en consecuencia que **nuestro sistema es caótico**.

El exponente Λ no permite, sin embargo, caracterizar completamente la fuerte dependencia de las condiciones iniciales de un sistema caótico [7]. De hecho, podemos definir un conjunto de n exponentes de Lyapunov, cada uno correspondiente a las n direcciones independientes de desviación que pueden elegirse desde la condición inicial⁵.

Dado que el espacio tangente no es más que la “linealización” de la variedad ambiente, la evolución de un vector tangente $\mathbf{w} \in T_{y(0)}M$ a la misma por acción del flujo (1.28) vendrá gobernada por la correspondiente linealización del mismo sistema diferencial:

$$\frac{d\mathbf{w}}{dt} = \mathbf{J}_f(y(t))\mathbf{w} \quad (2.16)$$

donde $\mathbf{J}_f(y(t))$ denota la jacobiana de f evaluada en el punto $y(t)$, el cual también evoluciona

⁴Nótese que los límites reiterados no pueden intercambiarse, ya que para sistemas con órbitas acotadas en M sería trivialmente nulo.

⁵Ya que la variedad M es de dimensión n , su espacio tangente en cada punto será un espacio vectorial también de dimensión n , por lo que en dicho punto existe un total de n direcciones independientes.

por acción del flujo. Es decir, si inicialmente tenemos un paralelepípedo n -dimensional de lados $\{\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_n\}$, la acción de la dinámica sobre los mismos vendrá regida por (2.16). El paralelogramo acabará deformado, expandido o contraído por cada uno de sus lados.

El Teorema de Osedelet nos garantiza la existencia de los exponentes de Lyapunov [7, 21] bajo condiciones muy generales. Denotemos por $\mathbf{M}(t)$ a la matriz que recoge la evolución temporal de los n vectores de la base canónica por acción del flujo. Es decir, $\mathbf{M}(t)$ satisface el sistema diferencial matricial:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \mathbf{J}_f(y(t))\mathbf{M}(t) \quad \mathbf{M}(0) = \mathbf{I}_n \quad (2.17)$$

Teorema 4 (Osedelet). *Para casi toda condición inicial $y(0)$, existe un conjunto ortonormal de vectores $\{\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_n\} \subset T_{y(0)}M$ tales que el límite siguiente existe:*

$$\lambda_j := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \|\mathbf{M}(t)\mathbf{w}_j\|, \quad \forall j = 1, \dots, n \quad (2.18)$$

donde λ_j son los n exponentes de Lyapunov, y por convenio $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n$. Además, también existe la matriz simétrica:

$$\mathbf{V} := \lim_{t \rightarrow \infty} (\mathbf{M}^T(t)\mathbf{M}(t))^{1/2t} \quad (2.19)$$

donde los vectores $\{\mathbf{w}_j\}$ se corresponden con los autovectores de $\mathbf{M}^T(t)\mathbf{M}(t)$ y donde

$$\lambda_j = \log \nu_j \quad (2.20)$$

con $sp(\mathbf{V}) = \{\nu_1, \dots, \nu_n\}$ el espectro de \mathbf{V} .

Para sistemas ergódicos⁶, los λ_j no dependerán de $y(0)$, por lo que estos límites representarán propiedades globales del sistema [7]. El Teorema de Osedelet permite determinar la tasa de deformación del volumen encerrado por un paralelepípedo de lados $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$, con $k \leq n$. Bajo los efectos del flujo, puede probarse [7] que la razón de variación promedio del volumen encerrado por el mismo está relacionada con la suma de los primeros k exponentes de Lyapunov a partir de la expresión:

$$\sum_{j=1}^k \lambda_j = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \left(\frac{\text{Vol}_k[\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k](t)}{\text{Vol}_k[\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k](0)} \right) \quad (2.21)$$

donde $\text{Vol}_k[\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k]$ indica la medida de Lebesgue k -dimensional⁷ encerrada por el paralelepípedo de lados $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k$. Dicho volumen puede obtenerse a partir de la norma del producto exterior $\mathbf{v}_1 \wedge \dots \wedge \mathbf{v}_n$, y para calcularlo numéricamente aplicaremos la siguiente proposición [12]:

⁶Véase el final de la sección 3.2.2 para una idea cualitativa sobre el concepto de sistema ergódico.

⁷En este caso no es necesario tomar límite cuando el volumen inicial tiende a 0 ya que se presupone que, al trabajar en el espacio tangente, este volumen será infinitesimal.

Lema 1. Sea $\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k\} \subset \mathbb{R}^n$ un conjunto de vectores linealmente independientes (con $k \leq n$). Sea $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 | \dots | \mathbf{a}_k]$. Se tiene que:

$$\text{Vol}_k[\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k] = \sqrt{\det(\mathbf{A}^T \mathbf{A})} \quad (2.22)$$

Por último, señalamos que para flujos hamiltonianos (es decir, para los que (1.28) es el sistema de ecuaciones canónicas de un sistema hamiltoniano de n grados de libertad), los exponentes de Lyapunov cumplen la siguiente propiedad (conocida como *regla de apareamiento*⁸) [3]:

$$\lambda_j = -\lambda_{2n-j+1}, \quad j = 1, \dots, n \quad (2.23)$$

por lo que sólo será necesario calcular la mitad de los exponentes.

Algoritmo para calcular los exponentes de Lyapunov

Presentamos a continuación un algoritmo introducido por Benettin en [3] para calcular los exponentes de Lyapunov asociados a un determinado sistema diferencial autónomo $y' = f(y)$. Como antes, denotaremos por $\mathbf{J}_f(y(t))$ a la jacobiana del flujo (1.28), evaluada en el punto $y(t)$.

Iteración $k = 1, \dots, n$:

1. Elegimos un conjunto ortonormal de vectores $\{\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_k\}$. Los evolucionamos vía el sistema diferencial:

$$\frac{d\mathbf{w}_j}{dt} = \mathbf{J}_f(y(t))\mathbf{w}_j(t) \quad (2.24)$$

(con $j = 1, \dots, k$) hasta el instante τ mediante un integrador apropiado (aquí los métodos RK son perfectamente válidos, ya que en principio la variedad ambiente no posee una estructura especial).

2. Calculamos el volumen deformado en el instante τ , $\alpha_k(\tau) := \text{Vol}_k[\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_k](\tau)$. Guardamos este valor.
3. Aplicamos el procedimiento de Gram-Schmidt al conjunto de vectores en el instante τ , recuperando un conjunto ortonormal. Volvemos al paso 1.

A partir de la expresión (2.21), se puede demostrar que [3]:

$$\sum_{j=1}^k \lambda_j = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N\tau} \sum_{m=1}^N \log \alpha_k(m\tau) \quad (2.25)$$

⁸La idea detrás de esta propiedad es el carácter simpléctico del mapa de evolución temporal de paso τ y la condición de transformación canónica en su forma matricial (Proposición 2).

y ya que conocemos la suma hasta el término $k - 1$ de la iteración anterior, podemos calcular λ_k . Hemos de tener en cuenta que los exponentes de Lyapunov se obtienen como límite del algoritmo anterior, no siendo especialmente representativas las propiedades de las primeras iteraciones del método.

2.2.2. *Smallest Alignment Index (SALI)*

Los exponentes de Lyapunov nos aportan criterios que permiten discernir entre el carácter caótico o regular de una determinada órbita. Sin embargo, en la práctica su implementación numérica no es del todo rápida y eficiente. El algoritmo expuesto en la sección anterior requiere integrar las ecuaciones de movimiento (junto con la evolución de los vectores en el espacio tangente) en al menos n ocasiones, lo cual puede conllevar elevados tiempos de cálculo. Es por ello que se han desarrollado otros métodos que permitan determinar numéricamente si una determinada órbita es o no caótica.

Ya hemos comentado en reiteradas ocasiones que una de las cualidades más notables del caos es la dependencia sensitiva de las condiciones iniciales. Como expusimos en la sección anterior, las desviaciones entre dos órbitas próximas inicialmente aumentan de manera exponencial y vienen caracterizadas por los exponentes de Lyapunov. De hecho, el Teorema de Oselelet pone de manifiesto que, para dinámicas caóticas, un vector arbitrario \mathbf{v} del espacio tangente tiende a alinearse en la dirección de uno de los autovectores \mathbf{w}_j (con $\lambda_j > 0$) dados por el teorema conforme avanza el tiempo. Esta alineación es más intensa cuanto mayor sea el máximo exponente de Lyapunov λ_1 . Sin embargo, también sabemos del capítulo anterior que muchas órbitas periódicas o cuasiperiódicas en sistemas hamiltonianos discurren sobre la superficie de un determinado toro de manera regular, por lo que no parece intuitivo que un vector tangente arbitrario deba alinearse con una dirección determinada.

Con esta idea en mente, Skokos en [26] introdujo el concepto de los “índices de alineación” (*alignment indices* en inglés) para determinar el carácter caótico de una cierta órbita correspondiente a un sistema hamiltoniano de uno, dos o tres grados de libertad. Para ello, definió las cantidades:

$$d_+(t) := \|\mathbf{v}_1(t) + \mathbf{v}_2(t)\| \quad d_-(t) := \|\mathbf{v}_1(t) - \mathbf{v}_2(t)\|$$

donde $\mathbf{v}_i(t)$ denota la evolución temporal de un cierto vector $\mathbf{v}_i(0)$ arbitrario por acción de la dinámica, siguiendo la misma ley que en (2.16). A partir de los dos parámetros anteriores, se define el mínimo índice de alineación (*smallest alignment index*, SALI, en inglés) como:

$$\text{SALI}(t) := \min\{d_+(t), d_-(t)\} \tag{2.26}$$

El comportamiento del SALI conforme avanza el tiempo nos permitirá determinar el carácter

caótico de una determinada órbita para un sistema de dos grados de libertad, tal y como expon-dremos a continuación [26, 33]:

1. Si nuestra órbita es regular, los vectores $\mathbf{v}_i(0)$ acabarán en el espacio tangente a un cierto toro del espacio fásico por acción de la dinámica, y no tenemos motivos aparentes para pensar que estos deban alinearse en torno a una determinada dirección. Por lo tanto, el SALI realizará oscilaciones en torno a un cierto valor positivo.
2. Si nuestra órbita es caótica, ambos vectores tenderán a alinearse con una de las direcciones principales \mathbf{w}_i dadas por el Teorema de Osedelet (normalmente, la asociada al máximo exponente de Lyapunov), correspondiente a un exponente de Lyapunov positivo. Es decir, los $\mathbf{v}_i(t)$ se alinearán paralela o antiparalelamente, dando lugar a un SALI que tiende a cero cuando $t \rightarrow \infty$.

La convergencia a cero del SALI para órbitas caóticas no tiene por qué ser instantánea, sino que normalmente se producirá a partir de un determinado instante de tiempo. Además, como dicho límite nunca podrá alcanzarse en la práctica, tendremos que fijar un intervalo de tiempo y un valor umbral para el SALI a partir de los cuales considerar que nuestra órbita es en efecto caótica. Más adelante señalaremos los criterios escogidos para nuestro sistema concreto.

Algoritmo para calcular el SALI

Presentamos para terminar el algoritmo que utilizaremos para calcular el SALI. De nuevo, denotamos por $\mathbf{J}_f(y(t))$ a la jacobiana del flujo, evaluada en el punto $y(t)$.

1. Elegimos un par de vectores ortogonales y normalizados $\{\mathbf{v}_1(0), \mathbf{v}_2(0)\}$. Seguimos la evolución de los mismos a partir del sistema diferencial:

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{J}_f(y(t))\mathbf{v}_i(t), \quad i = 1, 2$$

hasta el instante τ . Normalizamos los vectores obtenidos, que denotaremos también por $\mathbf{v}_i(\tau)$.

2. Calculamos el SALI en dicho instante de tiempo:

$$\text{SALI}(\tau) = \min\{\|\mathbf{v}_1(\tau) + \mathbf{v}_2(\tau)\|, \|\mathbf{v}_1(\tau) - \mathbf{v}_2(\tau)\|\}$$

Guardamos este valor.

3. Volvemos al paso 1, introduciendo como condiciones iniciales $\mathbf{v}_i(\tau)$.

Recordamos que la evolución del sistema diferencial (2.16) requiere seguir la evolución tanto de los puntos $y(t)$ como del vector en cuestión.

Capítulo 3

Resultados

Como mencionamos al principio de este trabajo, nuestro objetivo es resolver las ecuaciones canónicas asociadas al modelo de Hénon-Heiles (sección 1.3), así como estudiar la aparición natural del caos y cómo este depende de los parámetros característicos del sistema. En este capítulo, presentaremos el método de trabajo seguido y los resultados obtenidos tras los cálculos realizados.

Prestaremos especial atención a los aspectos que hemos detallado en secciones anteriores, sobre todo al carácter simpléctico del integrador escogido y a la elección de indicadores numéricos del caos adecuados y eficientes.

3.1. Procedimiento experimental

Hemos seguido casi en su totalidad el itinerario propuesto por Zotos en la referencia [33], a pesar de que en este artículo no se emplea un integrador simpléctico. Para resolver las ecuaciones de movimiento correspondientes al modelo de Hénon-Heiles (1.47), hemos usado el *software* MATLAB R2018a (ubicado en los ordenadores del Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Facultad de Física de la Universidad de Sevilla durante el presente año).

Detallamos a continuación todos los aspectos técnicos relativos a la simulación por ordenador:

1. Hemos usado el esquema simpléctico de tercer orden introducido en la sección 2.1.2 para resolver las ecuaciones de evolución (1.47). De entre la familia de parámetros mostrados en la referencia [20, Tb. 2], hemos elegido aquellos que proporcionan menor constante de error (mínimo error de truncamiento en norma cuadrática) y que recogemos en la tabla 2.1. Hemos tomado, al igual que Zotos en la referencia [33], un paso temporal de $k = 10^{-2}$, y para cada órbita realizaremos un total de 10^6 iteraciones. Finalmente, hemos comparado

los resultados obtenidos para un conjunto determinado de órbitas con los que arroja un esquema RK usual.

Como valor inicial para la coordenada x , elegiremos por defecto el valor $x_0 = 0$ a menos que indiquemos lo contrario.

2. El indicador numérico del caos que hemos usado mayoritariamente es el *Smallest Alignment Index*, SALI (véase sección 2.2.2). Recordamos que, para calcularlo, debemos seguir la evolución temporal de la pareja de vectores $\mathbf{v}_j(t)$ al mismo tiempo que integramos las ecuaciones de movimiento, para lo que implementamos un esquema RK de cuarto orden y paso $2k^1$. Calcularemos además los exponentes de Lyapunov y compararemos la velocidad de convergencia de ambos indicadores.

Como señalamos en la sección anterior, una determinada órbita será caótica si su SALI asociado tiende a cero cuando $t \rightarrow \infty$. Sin embargo, dicha convergencia puede ser lenta para algunas órbitas concretas (Zotos las denomina *sticky*). Seguiremos el criterio que este emplea, considerando que una órbita será caótica cuando el SALI es menor que 10^{-8} para un tiempo total de integración de 10^4 unidades temporales como mínimo².

3. Hallaremos las transformadas de Fourier de las señales $x(t)$ e $y(t)$ a partir del comando `fft` de MATLAB (un algoritmo numérico para calcular transformadas de Fourier). Comprobaremos si para las órbitas caóticas (aquellas con un SALI menor de 10^{-8} para tiempos suficientemente largos) aparece la banda continua de frecuencias que predijimos en la introducción teórica.
4. Dibujaremos y analizaremos cualitativamente las secciones de Poincaré $x = 0$ correspondientes a varias órbitas y valores de la energía, procediendo tal y como explicamos en la sección 1.2.3. En este caso, estas secciones corresponden a las coordenadas (y, p_y) del punto de corte de la órbita con el hiperplano $x = 0$.
5. Para estudiar de manera cuantitativa el “grado de caoticidad” presente en nuestro espacio fásico para una energía determinada, elegiremos aleatoriamente una familia de condiciones iniciales dentro de nuestra región accesible (en torno a 10^4 puntos) y calcularemos para cada una de ellas el valor asintótico del SALI, determinando así si dicha condición inicial conduce o no a una órbita caótica. Representaremos con un mapa de color las diferentes condiciones iniciales en la sección (y, p_y) ($x_0 = 0$) de la región accesible, donde el color representará el valor del SALI para cada una de las órbitas.
6. Estudiaremos la proporción de órbitas estables presentes en la región accesible a partir de los resultados del punto anterior. Estimaremos el valor crítico de la energía a partir del cual

¹Igual que para los exponentes de Lyapunov, para estudiar la evolución temporal del SALI no es necesario que el integrador sea simpléctico.

²Tal y como el mismo Zotos explica en la referencia [33], él adopta dicho criterio tras llevar a cabo una gran cantidad de pruebas numéricas para distintas órbitas.

emerge el caos en nuestro modelo, ya introducido por Hénon y Heiles en su artículo original [14]. Nosotros utilizaremos para ello el SALI, adaptando su idea a las nuevas técnicas que mostramos en este trabajo.

3.2. Resultados y discusión

En esta sección mostraremos los resultados obtenidos a partir de la simulación. En un anexo al presente trabajo incluimos el *script* MATLAB empleado para la obtención de gran parte de los mismos.

3.2.1. Análisis de la dinámica

Resultados obtenidos mediante integración simpléctica

El modelo de Hénon-Heiles nos proporciona una dinámica muy rica y variada, pudiendo encontrar condiciones iniciales que conducen a órbitas periódicas, cuasiperiódicas o caóticas para prácticamente todos los valores de la energía posibles. En este punto mostraremos varios ejemplos de cada uno de estos tipos de dinámica, señalados por Zotos en el artículo citado [33] y resueltos con el integrador simpléctico antes señalado.

En la figura 3.1 mostramos las secciones XY correspondientes a las condiciones iniciales mostradas en la tabla 3.1. La curva exterior (en naranja) marca los límites de la región del espacio fásico accesible por el sistema para el valor de la energía correspondiente (es decir, la curva $V(x, y) \equiv E$).

Órbita	E	y_0	p_{y_0}
(a)	0.12	0	0.24494897
(b)	0.12	0.29754452	0
(c)	0.12	0.54846395	0
(d)	0.02	-0.082	0
(e)	0.12	0.2	0
(f)	0.16	0.82	0

Tabla 3.1: Valores iniciales de las diferentes órbitas estudiadas en nuestro modelo

Recordamos que las órbitas correspondientes al modelo de Hénon-Heiles habitan en un espacio tetradimensional, descrito por las coordenadas (x, y, p_x, p_y) . La figura 3.1 se corresponde únicamente con las proyecciones de dichas órbitas sobre los ejes X e Y . Para reflejar las cuatro dimensiones que necesitamos para describir un punto de la órbita, hemos realizado las siguientes representaciones gráficas. En la figura 3.2 mostramos las proyecciones de las órbitas sobre el

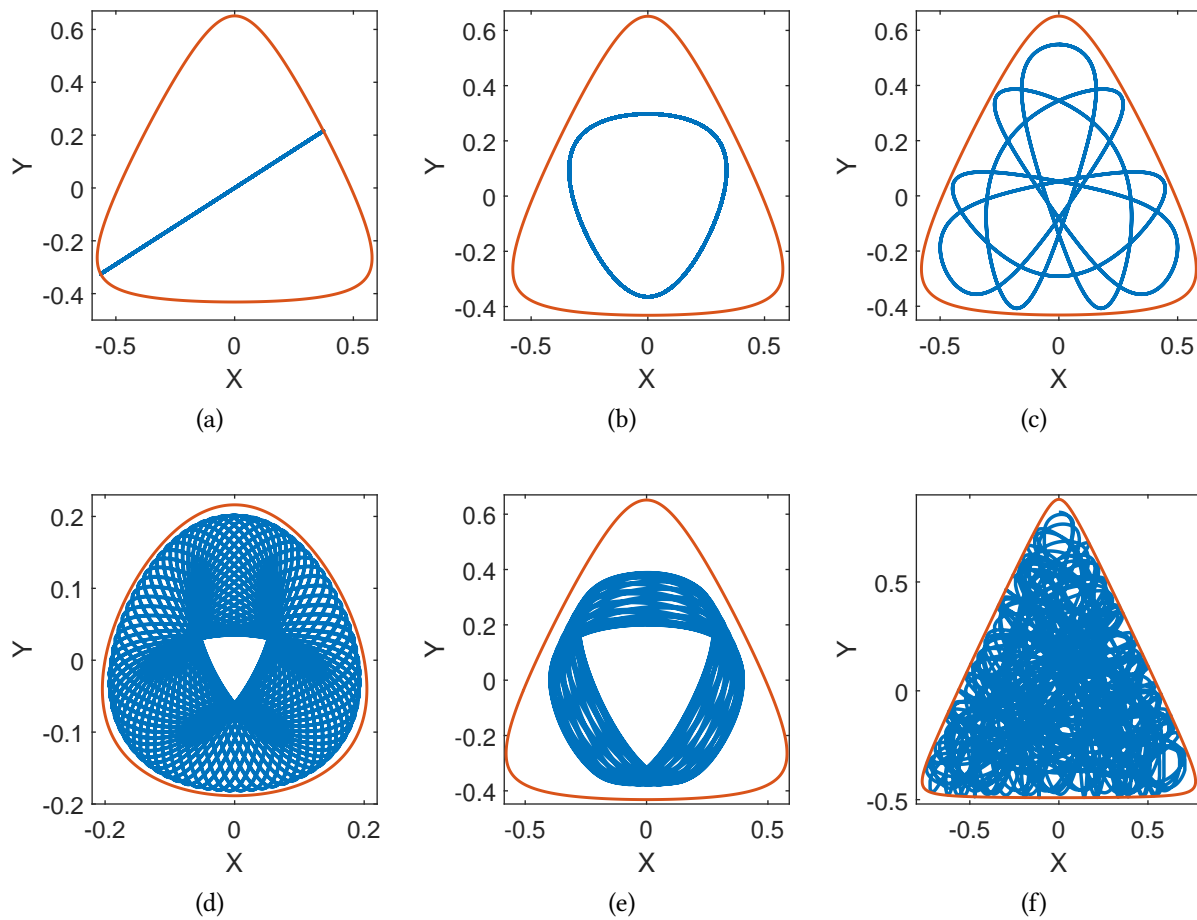


Figura 3.1: Secciones XY de las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales mostradas en la tabla 3.1. Los resultados han sido obtenidos mediante integración simpléctica. Para las figuras (d) y (e) hemos realizado $2,5 \cdot 10^4$ iteraciones

subespacio de tres dimensiones (x, y, p_y) , donde para caracterizar la cuarta dimensión restante p_x utilizamos una escala de color (estandarizada para todas las gráficas).

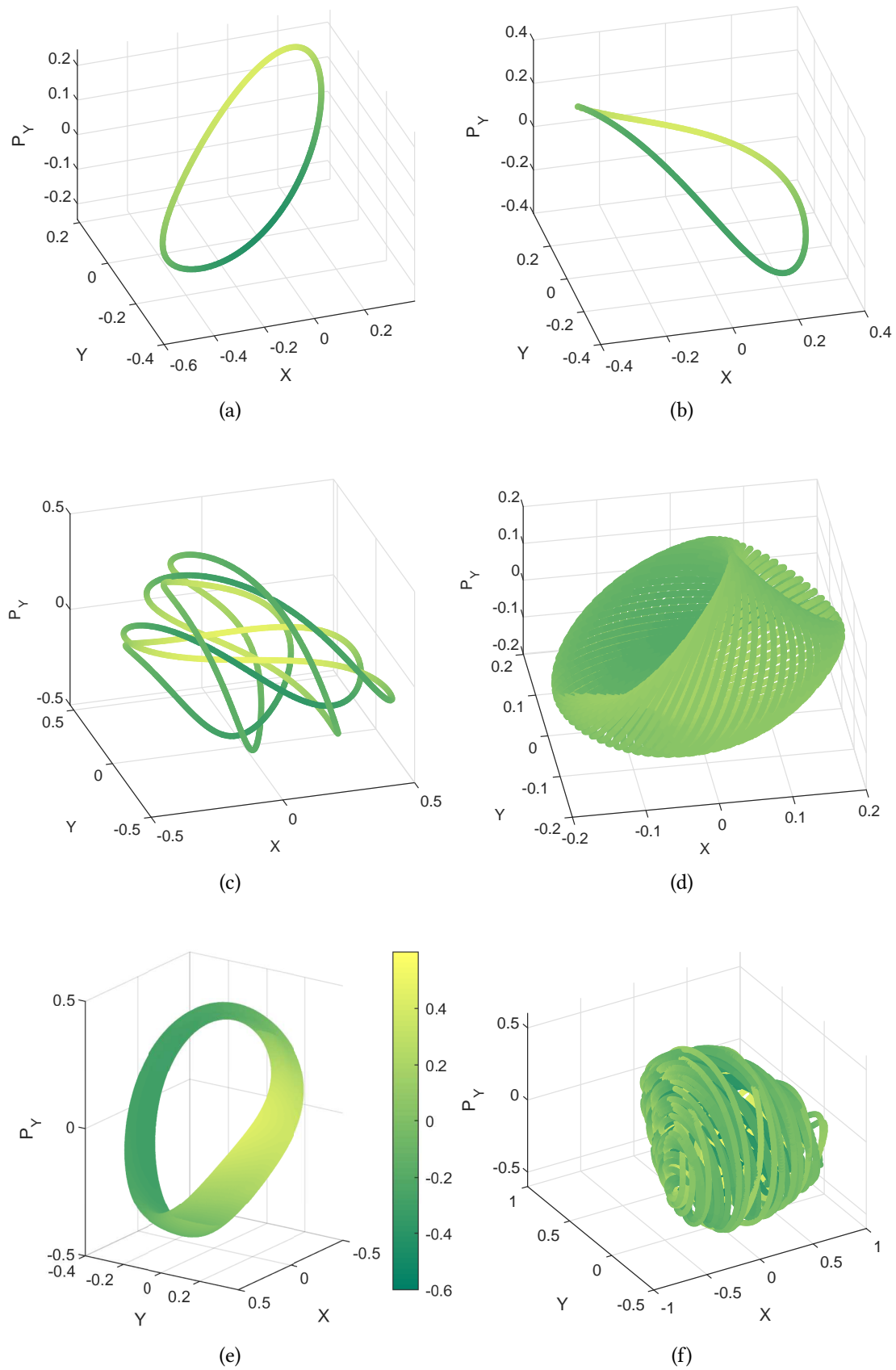


Figura 3.2: Representación tridimensional de las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales mostradas en la tabla 3.1, resueltas mediante integración simpléctica. El color indica la componente p_x correspondiente a cada punto

Comparación con los resultados obtenidos mediante un esquema Runge-Kutta

En esta sección compararemos los resultados obtenidos a partir de nuestro integrador simpléctico con los obtenidos a partir de un esquema RK de orden 4, mismo paso temporal ($k = 10^{-2}$) y mismo número de iteraciones (10^6). En la figura 3.3 mostramos las mismas secciones XY incluidas en la figura 3.1, pero empleando para su obtención el citado esquema RK.

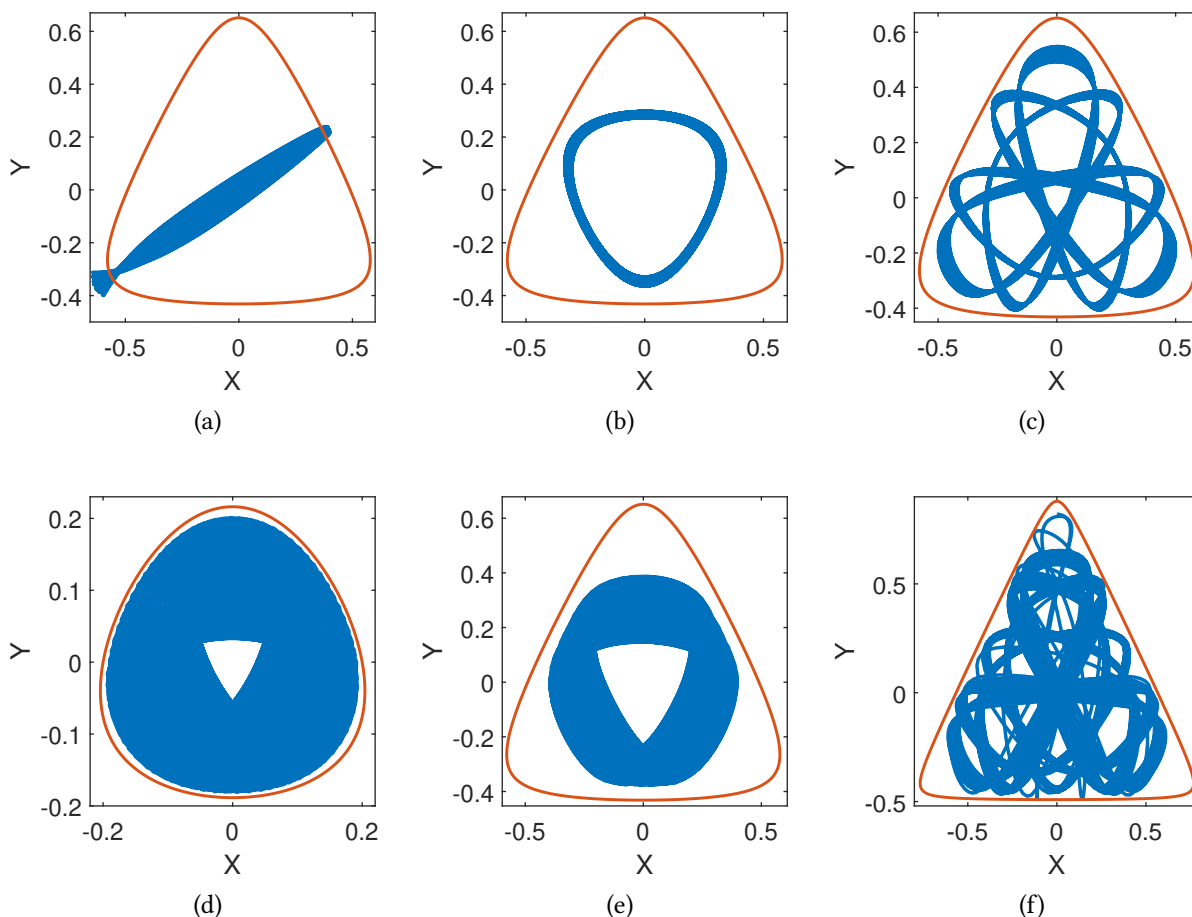


Figura 3.3: Secciones XY de las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales mostradas en la tabla 3.1, resueltas mediante un algoritmo RK de cuarto orden y paso temporal $k = 0,01$, para 10^6 iteraciones. Para las figuras (d) y (e) hemos realizado $2,5 \cdot 10^4$ iteraciones

Ya advertimos en la introducción teórica que normalmente la energía no era conservada por los algoritmos RK. Para comprobarlo, mostramos en la figura 3.4 una comparativa entre los valores de $\mathcal{H}(\mathbf{q}^{(n)}, \mathbf{p}^{(n)})$ obtenidos utilizando los dos algoritmos propuestos frente al tiempo.

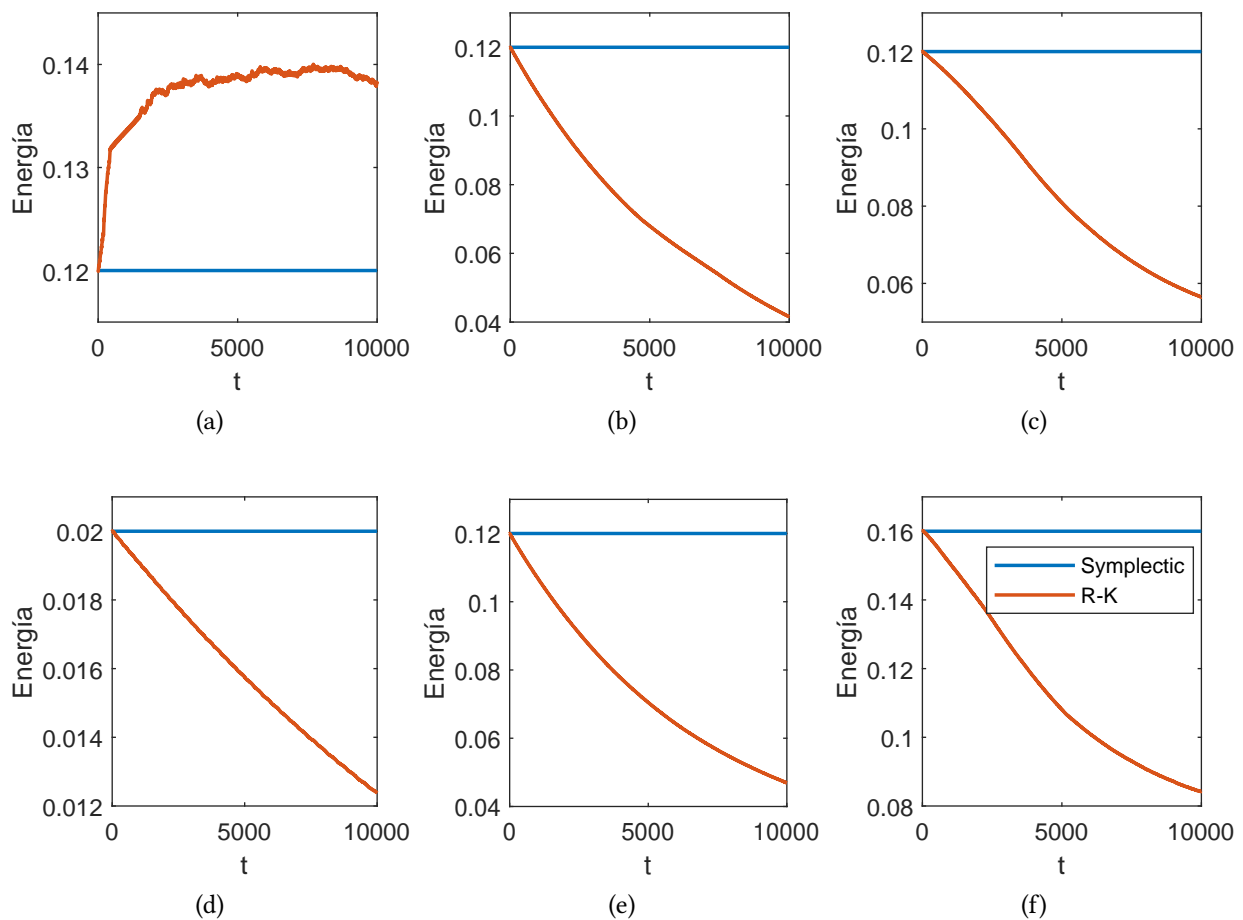


Figura 3.4: Evolución temporal de la energía del sistema a partir de los resultados obtenidos con los dos algoritmos señalados, para cada una de las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales mostradas en la tabla 3.1

Los dos últimos grupos de figuras expuestos (3.3 y 3.4) evidencian la necesidad de utilizar integradores simplécticos para estudiar la dinámica de un sistema caótico. Comenzando por la figura 3.4, comprobamos que los esquemas RK no conservan la energía del sistema, por lo que como hemos señalado en reiteradas ocasiones no podemos afirmar con certeza que los resultados obtenidos a partir de los mismos presentan o no caos. Pero además, ni siquiera los cálculos realizados por el esquema RK gozan de una precisión aceptable. En la figura 3.3 observamos que los resultados poseen un error considerable, propagado tras las sucesivas iteraciones del método. Por ejemplo, en la figura (a) deberíamos observar una línea definida, y lo que obtenemos es una “línea de trazo grueso” que ni siquiera se mantiene dentro de la región accesible por el sistema. Dichas representaciones gráficas nos podrían inducir a pensar, incluso, que nos encontramos ante órbitas cuasiperiódicas, lo cual sabemos que no es cierto a partir de la clasificación que recogemos en la tabla 3.2 y comentaremos un poco más adelante.

Indicadores cuantitativos del caos

Aparentemente, de las cinco órbitas mostradas en la figura 3.1, las cuatro primeras son periódicas o cuasiperiódicas y la quinta es caótica. Comprobaremos si estamos en lo cierto estudiando la evolución de los indicadores numéricos elegidos (exponentes de Lyapunov, SALI y espectros de frecuencias), observando también si nos arrojan los resultados esperados.

En la figura 3.5 mostramos la evolución temporal del SALI para tres órbitas representativas de las incluidas en la tabla 3.1 (en concreto, las órbitas (b), (d) y (f)) en escala logarítmica. Además, en la figura 3.6 mostramos la evolución del algoritmo de cálculo de los dos primeros exponentes de Lyapunov³, que denotamos por $\tilde{\lambda}_j(t)$, en escala semilogarítmica para las mismas órbitas anteriores. En la subfigura 3.6c $\tilde{\lambda}_2(t) \geq \tilde{\lambda}_1(t)$, cuando lo que parecería lógico es justo lo contrario. Sin embargo, ya señalamos al final de la sección 2.2.1 que $\tilde{\lambda}_j(t)$ no se corresponde con los exponentes de Lyapunov, por lo que su comportamiento no es representativo para tiempos intermedios (en el límite, puede comprobarse que $\lambda_1 \geq \lambda_2$, al ser ambos nulos).

³Recordamos (véase sección 2.2.1) que los exponentes de Lyapunov asociados a las ecuaciones canónicas de un sistema conservativo son iguales y de signo contrario por parejas.

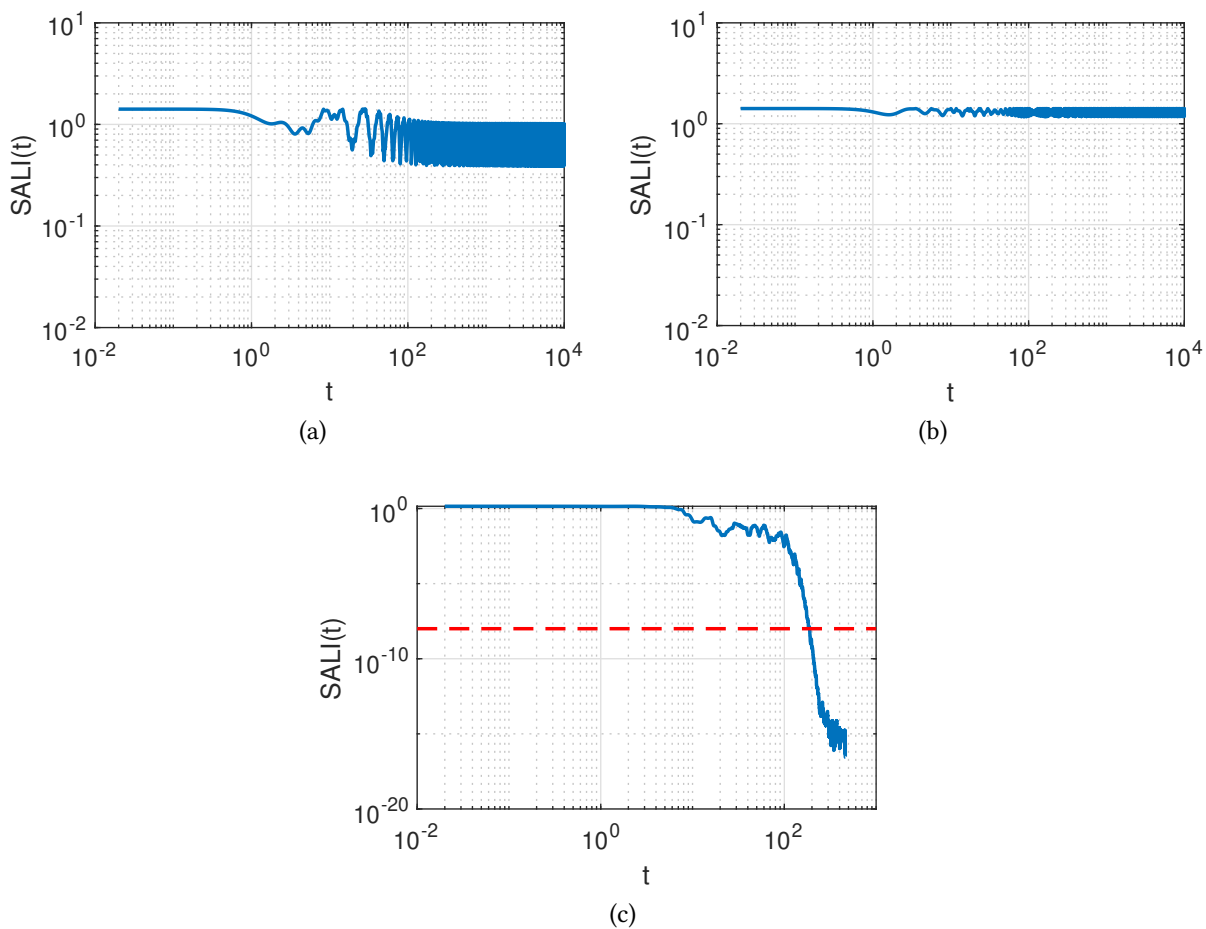


Figura 3.5: Evolución temporal del *Smallest Alignment Index* (SALI) para las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales (b), (d) y (f) mostradas en la tabla 3.1. La escala de los ejes es logarítmica. En la subfigura (c) señalamos con línea discontinua el valor umbral fijado para considerar una determinada órbita como caótica (10^{-8})

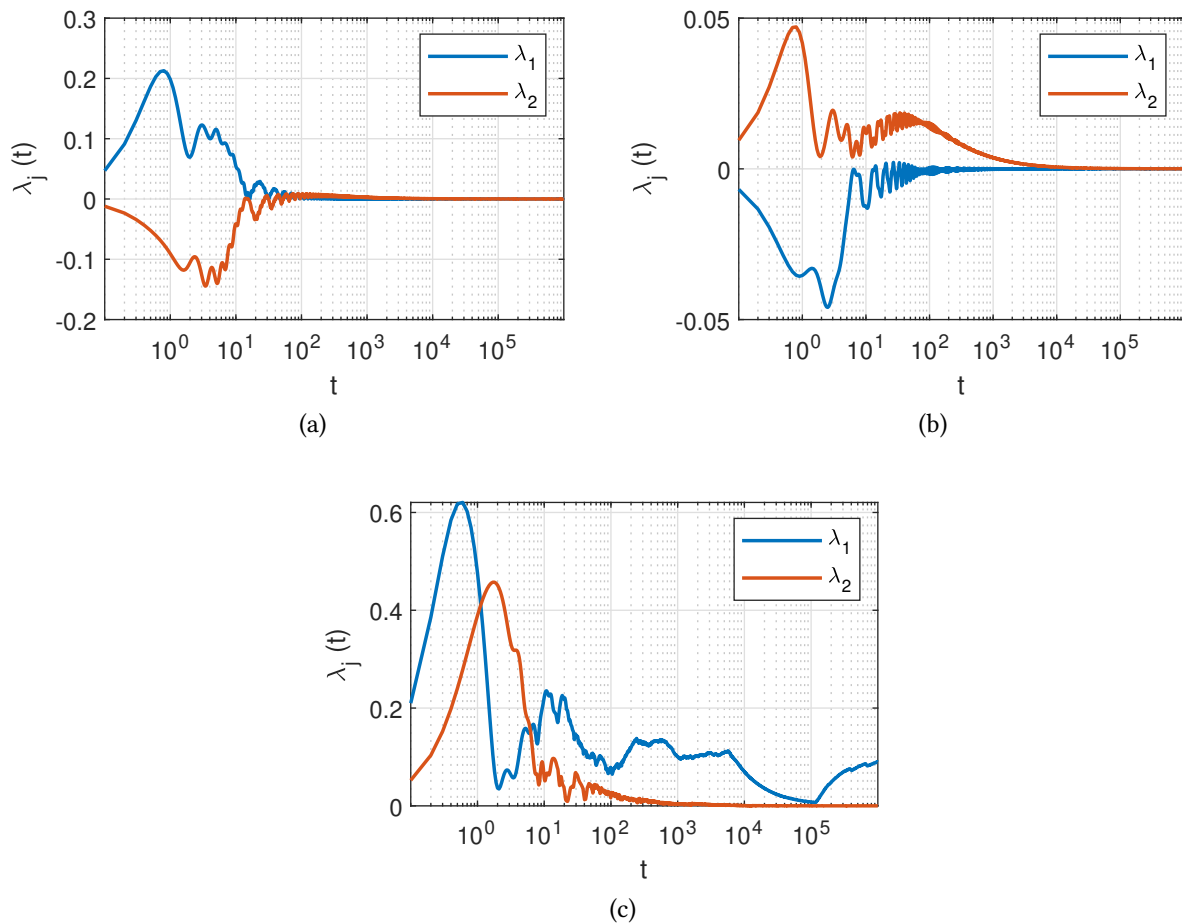


Figura 3.6: Evolución del algoritmo de cálculo de los dos primeros exponentes de Lyapunov, $\tilde{\lambda}_j(t)$, para las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales (b), (d) y (f) mostradas en la tabla 3.1. La escala de los ejes es semilogarítmica (lineal en el eje Y). Los exponentes de Lyapunov se corresponderán con los valores límite de $\tilde{\lambda}_j(t)$

A partir de las figuras anteriores, podemos extraer varias conclusiones. En primer lugar, el comportamiento del SALI es el esperado para las diferentes dinámicas consideradas. Tal y como adelantamos en la sección 2.2.2, para aquellas órbitas periódicas o cuasiperiódicas el SALI oscilará en torno a un cierto valor positivo, mientras que para órbitas caóticas dicho indicador tenderá a cero conforme el tiempo aumente. En nuestro caso, hemos alcanzado los límites de precisión de nuestro ordenador (10^{-16}) para la órbita caótica (f) en un tiempo menor al umbral fijado. En segundo lugar, podemos observar cómo la convergencia de los exponentes de Lyapunov es más lenta que la del SALI, algo especialmente notable para las órbitas (d) y (f)⁴. Comprobamos así que el SALI es más eficiente, al reducir los tiempos de cálculo necesarios para determinar el carácter caótico de una determinada órbita.

A continuación, analizaremos las transformadas de Fourier numéricas de las señales temporales $x(t)$ e $y(t)$. Para las órbitas (a)-(e), ambos espectros van a presentar picos en los mismos puntos, por lo que prescindimos de mostrar los dos. En la figura 3.7 presentamos las representaciones gráficas correspondientes.

⁴De hecho, puede comprobarse a la vista de la subfigura 3.6(c) que $\tilde{\lambda}_1(t)$ no converge de forma clara en un total de 10^8 iteraciones (10^6 unidades de tiempo), mientras que el SALI converge en torno a las 10^2 unidades temporales.

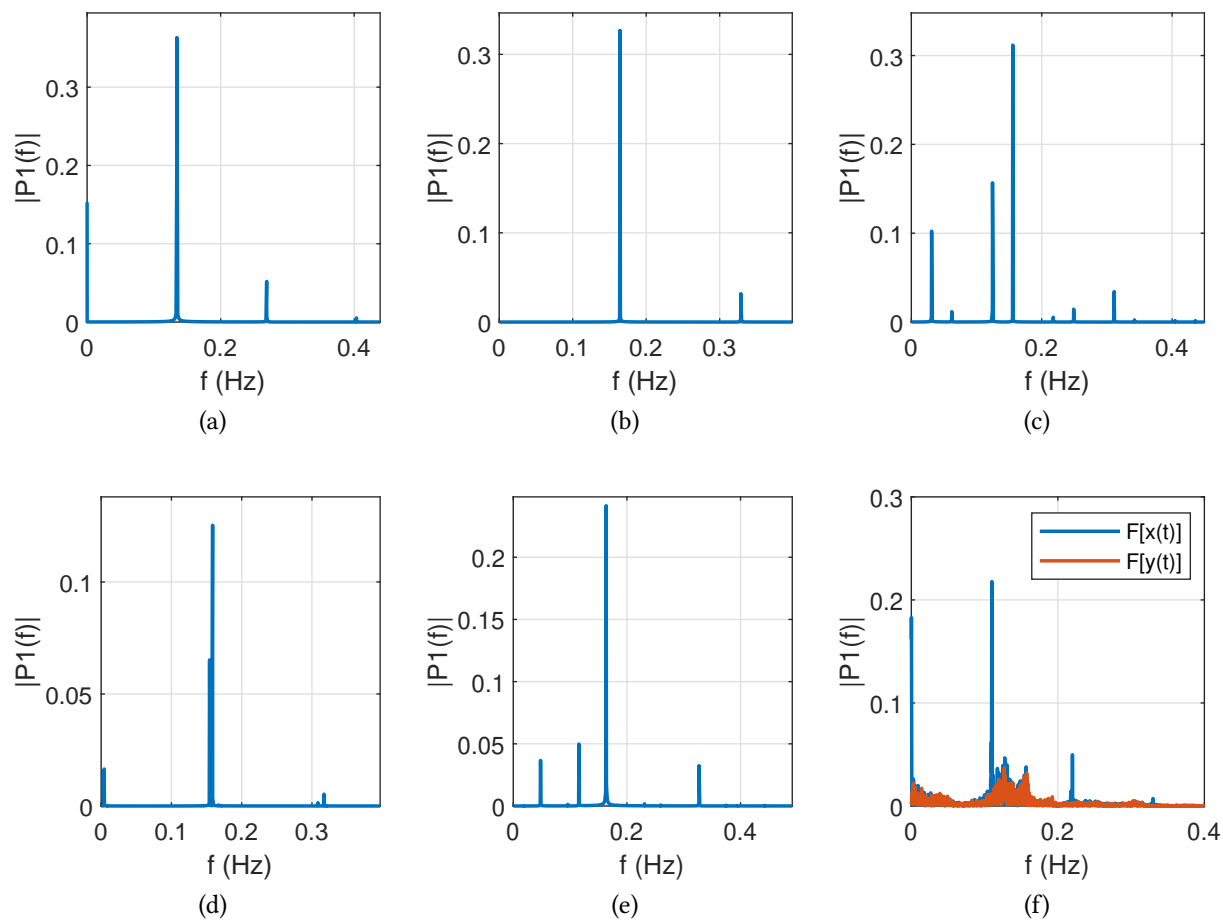


Figura 3.7: Transformada de Fourier numérica de la señal $x(t)$ para cada una de las órbitas correspondientes a las condiciones iniciales mostradas en la tabla 3.1. La subfigura (f) muestra superpuestas las transformadas de las señales $x(t)$ e $y(t)$, tal y como indica la leyenda

Órbita	Tipología [33]	Frec. fundamental (Hz)
(a)	1:1 lineal	0.1345
(b)	1:1 lazo	0.1644
(c)	5:5 lazo	0.0311
(d)	<i>Box</i>	-
(e)	<i>Box</i>	-
(f)	Caótica	-

Tabla 3.2: Tipología de las órbitas consideradas en la tabla 3.1, y frecuencia de oscilación del modo fundamental cuando corresponde

A la vista de dicha figura podemos señalar lo siguiente:

- Observamos cómo para las cinco primeras órbitas de las señaladas en la tabla 3.1, los espectros de frecuencias son discretos, mientras que para la órbita (f) aparece una banda continua de frecuencias entre los picos principales. Obtenemos así lo que ya adelantamos en la introducción teórica, así como los cinco primeros espectros refuerzan el hecho de que las órbitas correspondientes son regulares.
- El hecho de que para algunas señales (por ejemplo, la correspondiente a la órbita (a)) aparezca un pico a frecuencia cero nos indica que la partícula no oscila en torno al origen de coordenadas⁵.
- Es un error pensar que la banda continua de frecuencias (órbita (f)) se debe a errores numéricos; es una cualidad inherente al sistema. De hecho, es de vital importancia en situaciones diversas (como, por ejemplo, la electrónica) distinguir con claridad entre lo que es ruido electrónico y lo que es un comportamiento caótico de una determinada señal. Debemos recordar que *el caos no es un subproducto del azar*.

A partir de los espectros anteriores, podemos diferenciar dentro de las órbitas regulares aquellas que son periódicas de aquellas cuasiperiódicas. El método empleado se sale de los objetivos del presente trabajo, y puede encontrarse información detallada en la referencia [6]. Nosotros nos limitaremos a mostrar la clasificación hecha por Zotos en la citada referencia [33] para las mismas órbitas de la tabla 3.1.

En la tabla 3.2 recogemos dicha clasificación. Con la notación $n : m$ entendemos que la señal $x(t)$ describe un total de m periodos en el tiempo que $y(t)$ describe n periodos. Cuando n y m son elevados (Zotos considera “elevado” más allá de 10), la órbita pasa a ser considerada cuasiperiódica (a estas órbitas también se las denomina *boxes*). El cociente m/n coincide con el cociente de frecuencias correspondientes a los picos más intensos en los espectros de $x(t)$ e $y(t)$ [33]. En la citada tabla también incluimos el valor de la frecuencia fundamental⁶ de la señal $x(t)$ para las órbitas periódicas, a partir del espectro que hemos obtenido.

⁵A frecuencia cero, la transformada de Fourier coincide con el promedio de la señal, el cual debería ser nulo si el punto de equilibrio fuera el origen de coordenadas.

⁶Por *frecuencia fundamental* entendemos la menor frecuencia no nula que aparece en el espectro de nuestra señal.

3.2.2. Secciones de Poincaré

Como ya introdujimos en el primer capítulo, el estudio de las secciones de Poincaré nos es de gran utilidad para analizar la dinámica de nuestro sistema y la aparición del caos. En esta sección mostraremos y estudiaremos las secciones de Poincaré $x = 0$ correspondientes a varias órbitas y energías, inspirándonos en la descripción que proporciona la referencia [7] para nuestro mismo modelo. De este punto en adelante, nos referiremos por “diagramas de Poincaré” a una representación conjunta de varias secciones de Poincaré correspondientes a una misma energía.

Comenzamos estudiando las secciones de Poincaré para varias órbitas de energía $E = 1/12$, las cuales recogemos en la figura 3.8. Observamos mayoritariamente curvas cerradas y algunas líneas punteadas, que se corresponden como ya hemos comentado con órbitas cuasiperiódicas y periódicas respectivamente. Cada familia de color está asociada con una misma órbita, donde usamos una tonalidad más clara para indicar que la sección de Poincaré se ha elegido considerando el sentido contrario de avance en la coordenada x (véase sección 1.2.3). A la vista de la figura, el Teorema KAM parece verificarse, ya que la mayoría de las curvas representadas se corresponde con órbitas regulares. Sin embargo, este razonamiento es incompleto y puramente cualitativo; solamente a partir de los resultados numéricos que expondremos en la siguiente sección podremos convencernos de que esto es verdaderamente así.

Podemos notar también que una de las curvas mostradas en la figura separa la región accesible en varias zonas (la hemos dibujado en color negro); se corresponde con una separatriz del sistema (véase sección 1.2.5). En este caso, la separatriz une tres puntos fijos inestables del mapa de Poincaré Π , productos de la destrucción de un toro resonante por parte de la perturbación. Como comentamos en la introducción teórica, es en torno a los puntos fijos inestables donde surge el caos conforme la perturbación se hace más intensa.

Si analizamos en detalle la región del diagrama de Poincaré en torno a una de las autointersecciones de la separatriz, observamos una pequeña “nube” de puntos (no debe pensarse que su aparición se debe a errores numéricos), rellenando de forma un tanto irregular una pequeña porción del diagrama. En la figura 3.9 puede notarse más claramente este hecho. Para una energía de $E = 1/12$, el caos, que hasta ahora parecía oculto por el comportamiento regular del sistema, ha emanado en torno a este punto del espacio fásico. Para las otras dos autointersecciones que pueden verse en la figura ocurre exactamente el mismo fenómeno.

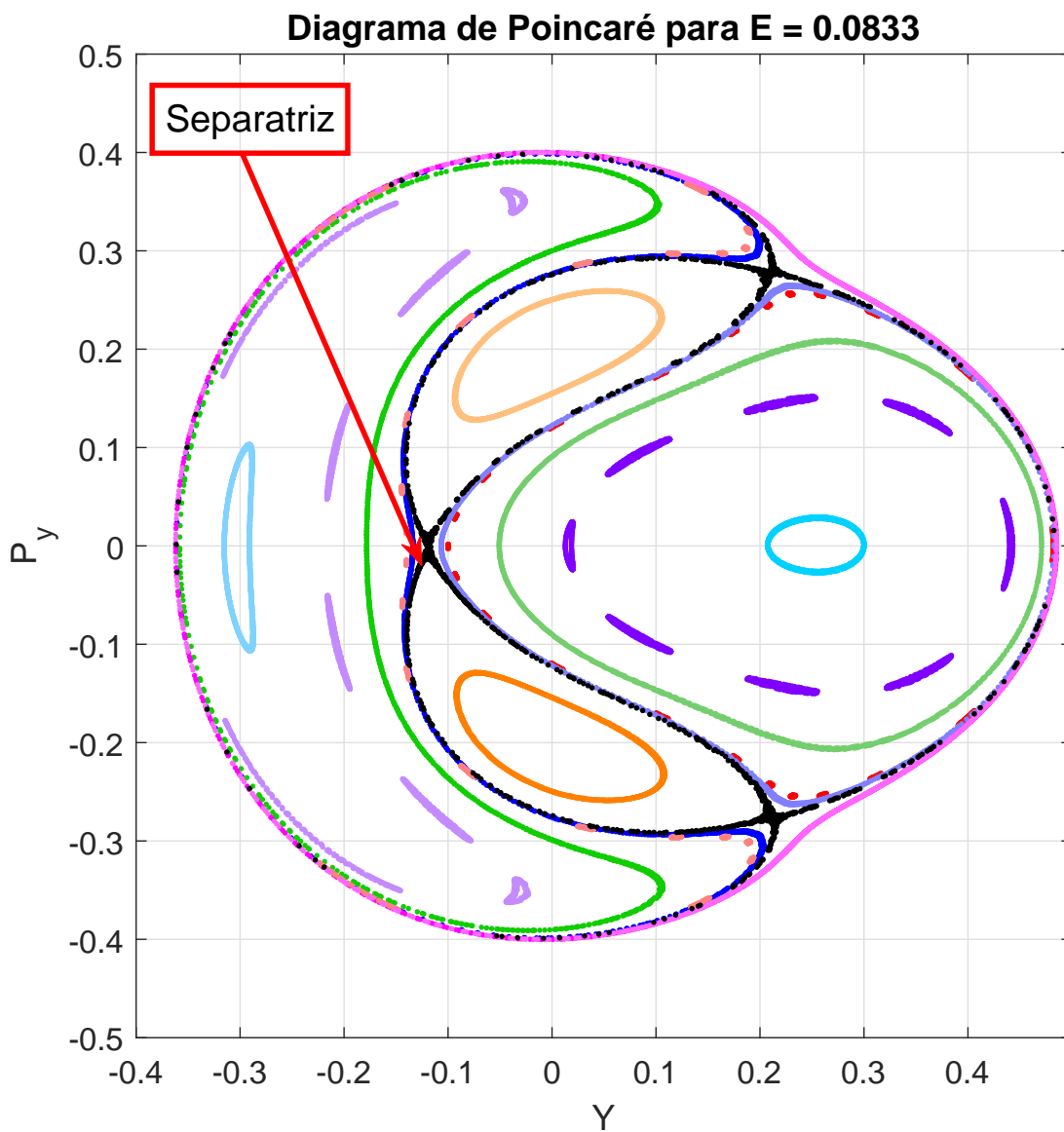


Figura 3.8: Secciones de Poincaré para varias órbitas de energía $E = 1/12$. Representamos con un mismo color, pero de diferente intensidad, aquellas secciones correspondientes a sentido creciente de x (mayor intensidad) y a sentido decreciente de x (menor intensidad). Señalamos con una flecha una separatriz del sistema, dibujada en color negro

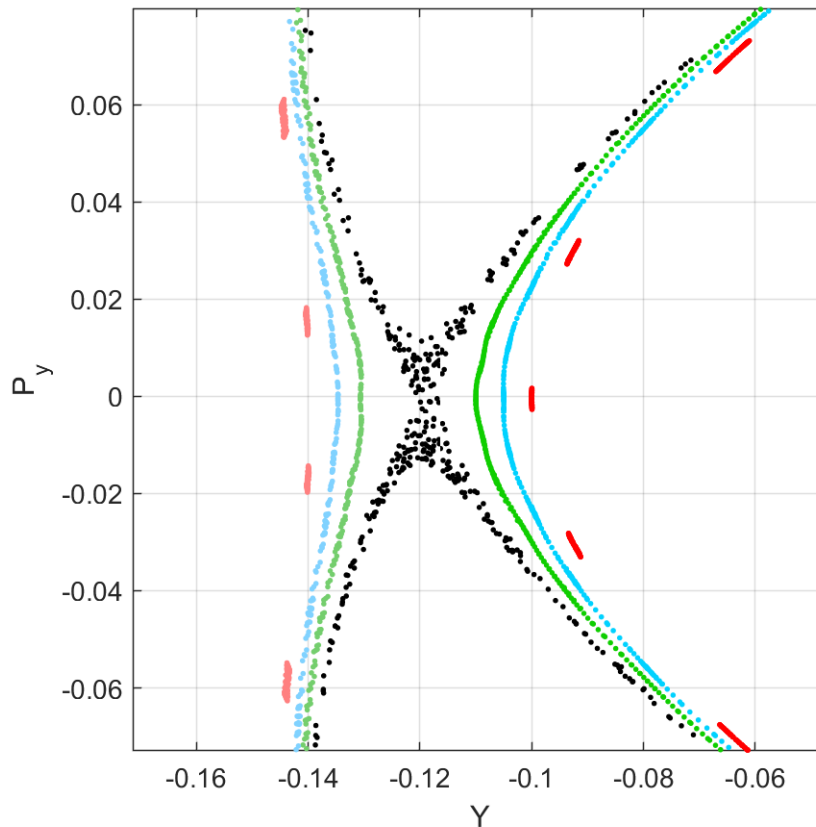


Figura 3.9: Detalle de la separatriz señalada en la figura 3.8, dibujada en color negro. Puede notarse que la separatriz deja de ser una curva de trazo definido, pasando a ser un acumulado de puntos en esta región concreta del plano (y, p_y)

Estudiemos a continuación el diagrama de Poincaré correspondiente a una energía de $E = 0,12$, mostrado en la figura 3.10. Podemos observar que la estructura es mucho más compleja que la de la figura 3.8. Hemos dibujado en color negro aquellas órbitas regulares señaladas en la tabla 3.1 y que estudiamos con detalle en la sección anterior (dibujamos, además, una nueva órbita, “lazo 4:4”, analizada también por Zotos en la citada referencia). Debido a que estas órbitas son periódicas, sus secciones de Poincaré serán puntos aislados.

En primer lugar, observamos la aparición de un “mar de puntos” que rellena gran parte del diagrama (nótese, por el color empleado, que es producido por una única curva). Para este valor de la energía, la perturbación es lo suficientemente intensa como para que el caos se manifieste claramente. El mapa de Poincaré Π lleva un punto a otro de esta órbita de manera aparentemente errática, de un extremo a otro del espacio fásico. Sin embargo, este *mar caótico* no puede inundar las *islas regulares*, formadas por curvas cerradas en el diagrama, debido a que los toros separan en dos regiones disjuntas la SEC⁷.

Estudiemos en segundo lugar el comportamiento de las islas regulares. Una órbita regular

⁷Recordamos que esto no tendría por qué ocurrir en sistemas donde la difusión de Arnold esté presente (para $n \geq 3$ grados de libertad).

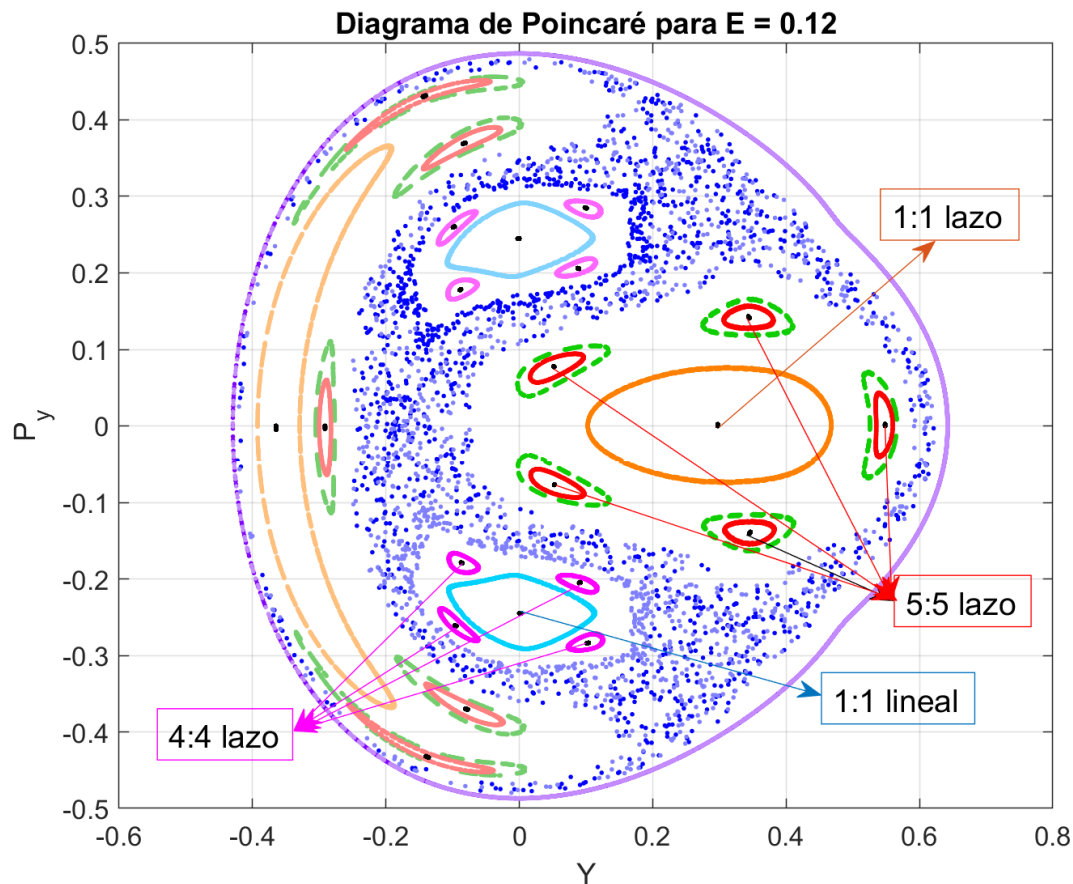


Figura 3.10: Secciones de Poincaré para varias órbitas de energía $E = 0,12$. Representamos con un mismo color, pero de diferente intensidad, aquellas secciones correspondientes a sentido creciente de x y a sentido decreciente de x . Señalamos con flechas las secciones de Poincaré correspondientes a algunas de las órbitas periódicas de las recogidas en la tabla 3.1

de tipo $n : n$ tiene por sección de Poincaré un conjunto discreto de n puntos [33]. Podemos comprobar, observando la figura 3.10, que esta afirmación se verifica para las órbitas señaladas. Ya que estas se corresponden con puntos fijos estables por Π , esperamos que en torno a cada punto de las secciones de Poincaré correspondientes aparezcan curvas cerradas en el diagrama (véase sección 1.2.5).

Analicemos con más detalle la región circundante a un conjunto de islas regulares (figura 3.11). El punto negro central (a) se corresponde, tal y como veíamos en la figura 3.10, con la órbita 1:1 lazo. En torno a dicho punto aparecen curvas cerradas, islas regulares “primarias”, todas ellas correspondientes a órbitas cuasiperiódicas o de índices $n : m$ muy elevados (al formar curvas de trazo continuo o muy cercano al continuo). A partir de la curva azul claro (b), la estructura aumenta en complejidad, y aparece un total de cinco “islotos secundarios”, cada uno rodeando a la sección de Poincaré correspondiente a la órbita 5:5 lazo señalada en la figura 3.10. La estructura en torno a estos nuevos puntos es *similar* a la observada para el islote primario. A su vez, cerca de estos islotos secundarios aparecen otros siete “islotos terciarios” en color cian (c), encerrando

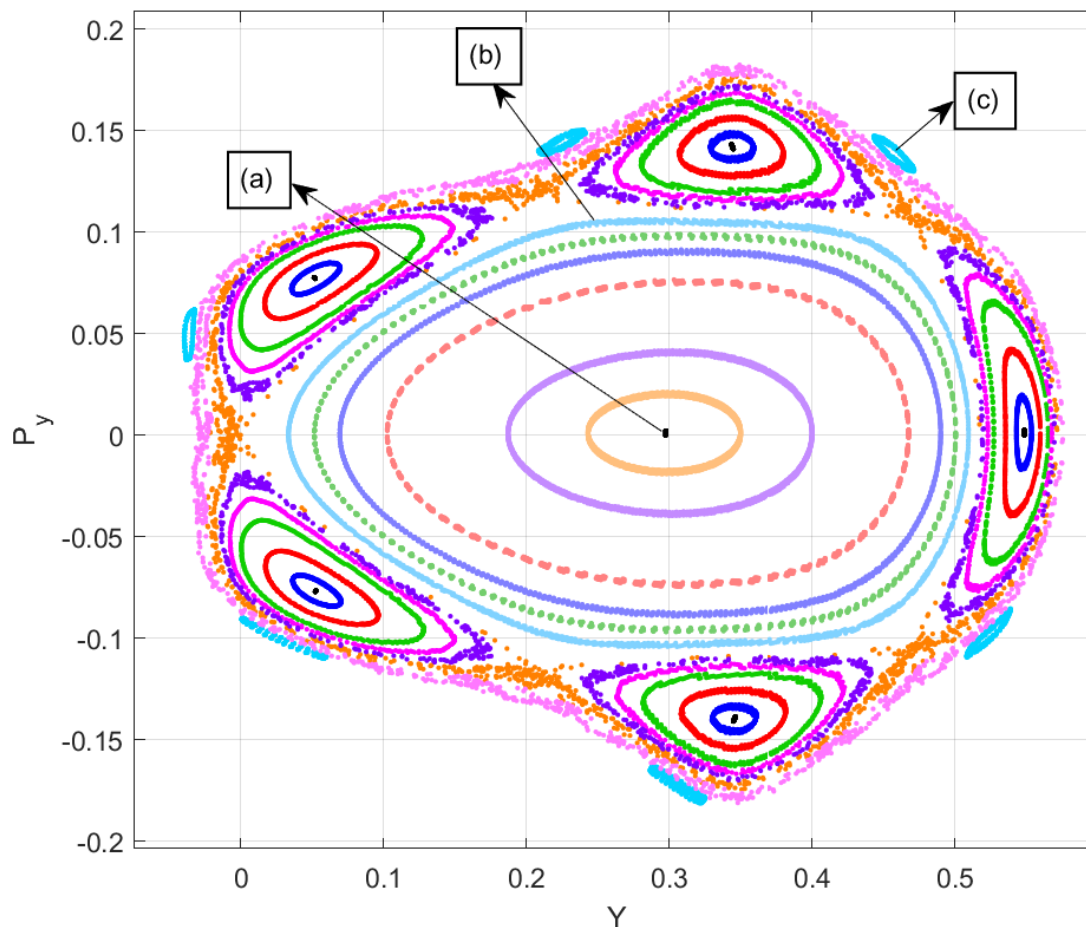


Figura 3.11: Detalle del diagrama de Poincaré correspondiente a $E = 0,12$ en torno a la órbita 1:1 lazo señalada en la figura 3.10. Pueden observarse varias cadenas de islas regulares, rodeando a puntos fijos del mapa de Poincaré. En esta gráfica el cambio de intensidad en el color no tiene ningún significado especial

de nuevo alguna órbita periódica.

Podemos comprobar así lo que mencionamos en la introducción teórica: en torno a los puntos fijos estables del mapa de Poincaré aparece una familia infinita de cadenas de islas, cada cual semejante a su progenitora. Este hecho recuerda a la estructura de los fractales, un concepto fundamental en la geometría del caos. En ellos, las figuras observadas a pequeña escala son copias semejantes a aquellas observadas a escalas mayores, fenómeno conocido como *autosimilitud*.

Observamos también para esta última figura la aparición de nuevas separatrices. Conforme las islas se alejan de los puntos fijos a los que rodean, estas dejan de ser curvas continuas y bien definidas para pasar a estar compuestas por esa “nube” que ya observábamos en la figura 3.9. Como en aquel caso, las autointersecciones de las separatrices se corresponderán con puntos fijos inestables del mapa de Poincaré, de los cuales emanará de forma natural el caos.

Para terminar con este análisis de los diagramas de Poincaré, haremos algunos comentarios

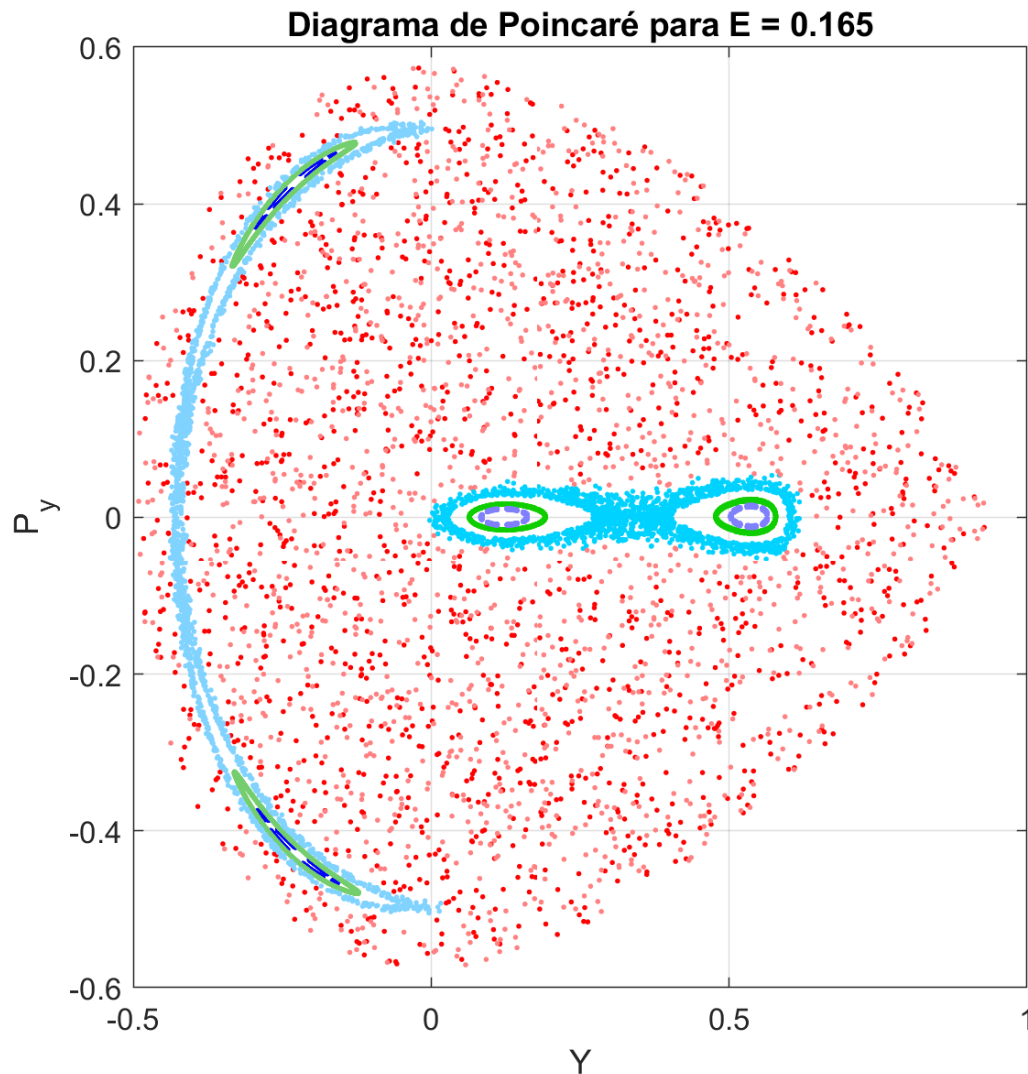


Figura 3.12: Secciones de Poincaré para varias órbitas de energía $E = 0,165$. Representamos con un mismo color, pero de diferente intensidad, aquellas secciones correspondientes a sentido creciente de x y a sentido decreciente de x

sobre el diagrama obtenido a partir de órbitas de energía $E = 0,165$ (figura 3.12). En este caso, prácticamente toda la región del espacio fásico accesible es rellenada por una única órbita (dibujada de color rojo en dos tonalidades), y aun para tan altas energías persisten algunos reductos de regularidad en medio del océano de caos que inunda el diagrama (islas centrales). Estas islas están separadas del mar caótico, de nuevo, por separatrices, de cuyas autointersecciones sigue emanando caos de manera incesante.

Para mostrar que los puntos del citado mar corresponden, en efecto, a órbitas caóticas, en la figura 3.13 representamos las secciones de Poincaré asociadas a dos órbitas con condiciones iniciales muy próximas. Observamos que ambas dan lugar a puntos diferentes en el diagrama de Poincaré, y que ambas tienen por sección de Poincaré un mar caótico. En las figuras 3.14a y 3.14b mostramos también las señales $x(t)$ e $y(t)$ frente al tiempo para reforzar aún más este

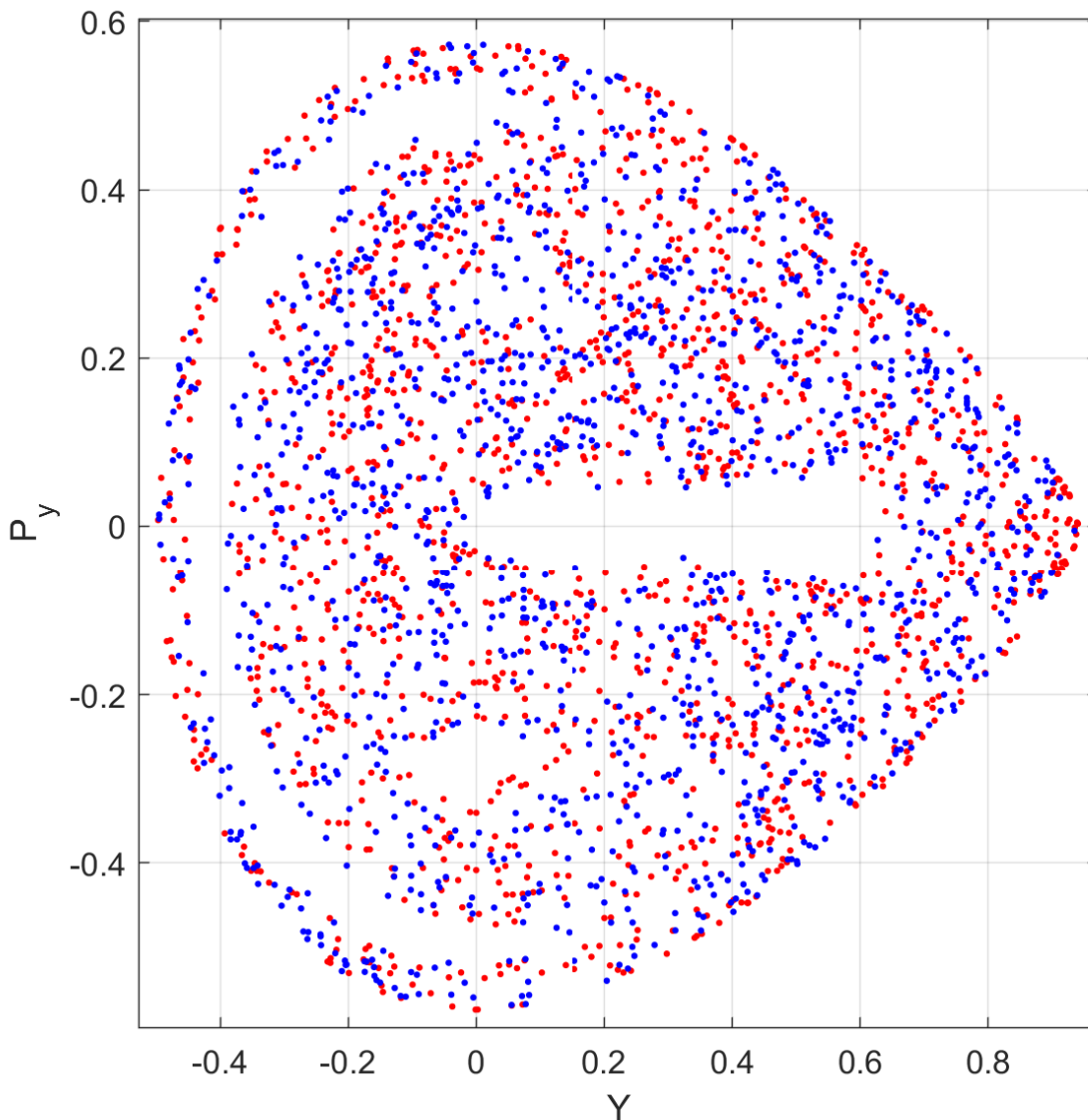


Figura 3.13: Secciones de Poincaré correspondientes a dos órbitas de condiciones iniciales $(E, y_0, p_{y0}) = (0,165, -0,2046, 0,1233)$ (azul) y $(E, y_0, p_{y0}) = (0,165, -0,2045, 0,1233)$ (rojo). Puede comprobarse que, a pesar de partir de condiciones iniciales muy próximas, ambas tienen secciones de Poincaré muy diferentes

hecho (la segunda de ellas es un recorte de la primera en torno a $t = 0$). Tal y como comentamos en la introducción teórica, las soluciones de un sistema diferencial son continuas respecto a las condiciones iniciales, lo cual no implica ni mucho menos que para intervalos de tiempo largos ambas soluciones sigan estando “cerca” una de la otra.

Por último, en la figura 3.15 representamos la misma sección de Poincaré (color rojo) de la figura 3.13 pero realizando un total de 10^8 iteraciones. Podemos comprobar que dicha órbita tiende a rellenar en solitario toda la región que le es accesible, limitada por ciertas separatrices señaladas en figuras anteriores, que separan el mar caótico de las islas regulares supervivientes.

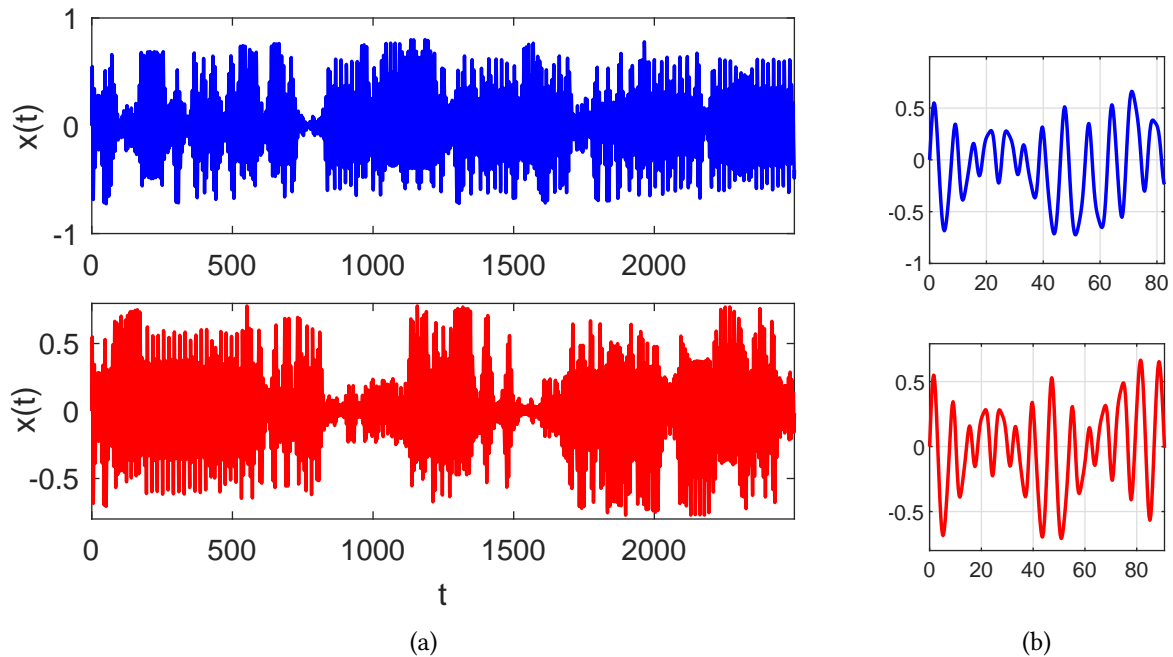


Figura 3.14: Señales $x(t)$ frente al tiempo correspondientes a dos órbitas de energía $E = 0,165$ y condiciones iniciales $(y_0, p_{y0}) = (-0,2046, 0,1233)$ (azul), $(y_0, p_{y0}) = (-0,2045, 0,1233)$ (rojo). Puede comprobarse que ambas señales siguen una evolución temporal muy diferente, a pesar de partir de condiciones iniciales tan próximas. A la derecha, detalle de las señales anteriores cerca del instante $t = 0$. Puede observarse que la forma de ambas señales es muy similar para tiempos pequeños, pero rápidamente las diferencias entre ellas se hacen notables

La fuerte dependencia de las condiciones iniciales produce que rápidamente la órbita pierda información sobre ellas, y esta tiende a pasar por todos los puntos del espacio fásico sin importar su procedencia.

Esta última cualidad es compartida con los llamados *sistemas ergódicos*, los cuales se caracterizan por que para casi toda condición inicial la órbita correspondiente pasará por cualquier región de medida finita de la SEC. Hasta mediados del siglo pasado, se pensaba que la perturbación de un sistema integrable era una de las causantes del carácter ergódico, pero precisamente el Teorema KAM lo impide: casi todos los toros sobreviven cuando esta es poco intensa, confiando en su interior a las órbitas del sistema. Sin embargo, como hemos comprobado en la figura 3.15, son muchas las condiciones iniciales de este tipo de sistemas las que conducen a órbitas que atraviesan una gran superficie del espacio fásico accesible [18].

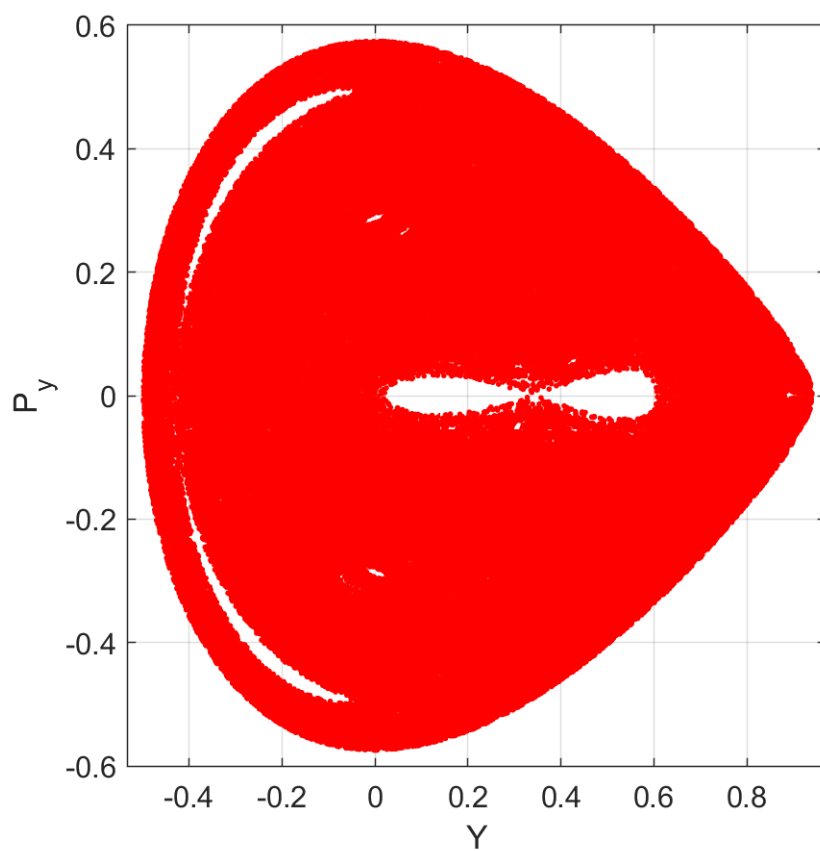


Figura 3.15: Sección de Poincaré asociada a una órbita de condiciones iniciales $(E, y_0, p_{y0}) = (0, 165, -0, 2045, 0, 1233)$ (de color rojo en la figura 3.13). Puede comprobarse cómo una sola órbita caótica tiende a rellenar toda la región accesible conforme el tiempo tiende a infinito

3.2.3. Mapa de condiciones iniciales

En la sección anterior, hemos analizado de manera cualitativa cómo el caos se hace presente conforme la intensidad de la perturbación aumenta. En esta última sección, estudiaremos cuantitativamente este fenómeno. Para ello, elegiremos para varios valores de la energía E un determinado conjunto de condiciones iniciales (y_0, p_{y0}) , y calcularemos para cada uno el valor al cual el SALI converge, $s_{lim}(y_0, p_{y0}) := \text{SALI}(t \rightarrow \infty; y_0, p_{y0})$. A cada valor $s_{lim}(y_0, p_{y0})$ obtenido le asignaremos un color (más en concreto, a su logaritmo decimal), y representaremos cada punto (y_0, p_{y0}) del color asignado en un diagrama, dibujando así un mapa de estabilidad para la energía elegida. En la figura 3.16 mostramos los mapas citados para cuatro valores de energía diferentes (se incluyen en el título de cada imagen).

Haremos a continuación un breve comentario sobre cada uno de los mapas de estabilidad, aunque estos únicamente reforzarán lo que ya expusimos en la sección anterior. Para una energía $E = 0,02$, toda la figura está teñida de color rojo, lo que claramente confirma que el Teorema KAM se verifica en nuestro sistema. Las diferentes intensidades de color nos indican que no todas las órbitas oscilan en torno al mismo valor del SALI, aunque sí todas tienen un valor límite por encima del umbral que hemos establecido. Por lo tanto, todas las órbitas del mapa de estabilidad son regulares para el valor de E considerado.

Algo similar ocurre para una energía $E = 0,08$ (dicha gráfica se correspondería, aproximadamente, con el diagrama de Poincaré de energía $E = 1/12$, figura 3.8). La inmensa mayoría de las condiciones iniciales dan lugar a órbitas no caóticas. Sin embargo, pueden apreciarse varios puntos de colores verde y azul, correspondientes a órbitas que sí lo son. En concreto, estos se encuentran en torno a las autointersecciones de la separatriz mostrada en la figura antes citada. Mostramos en la figura 3.17 un detalle de la región mencionada.

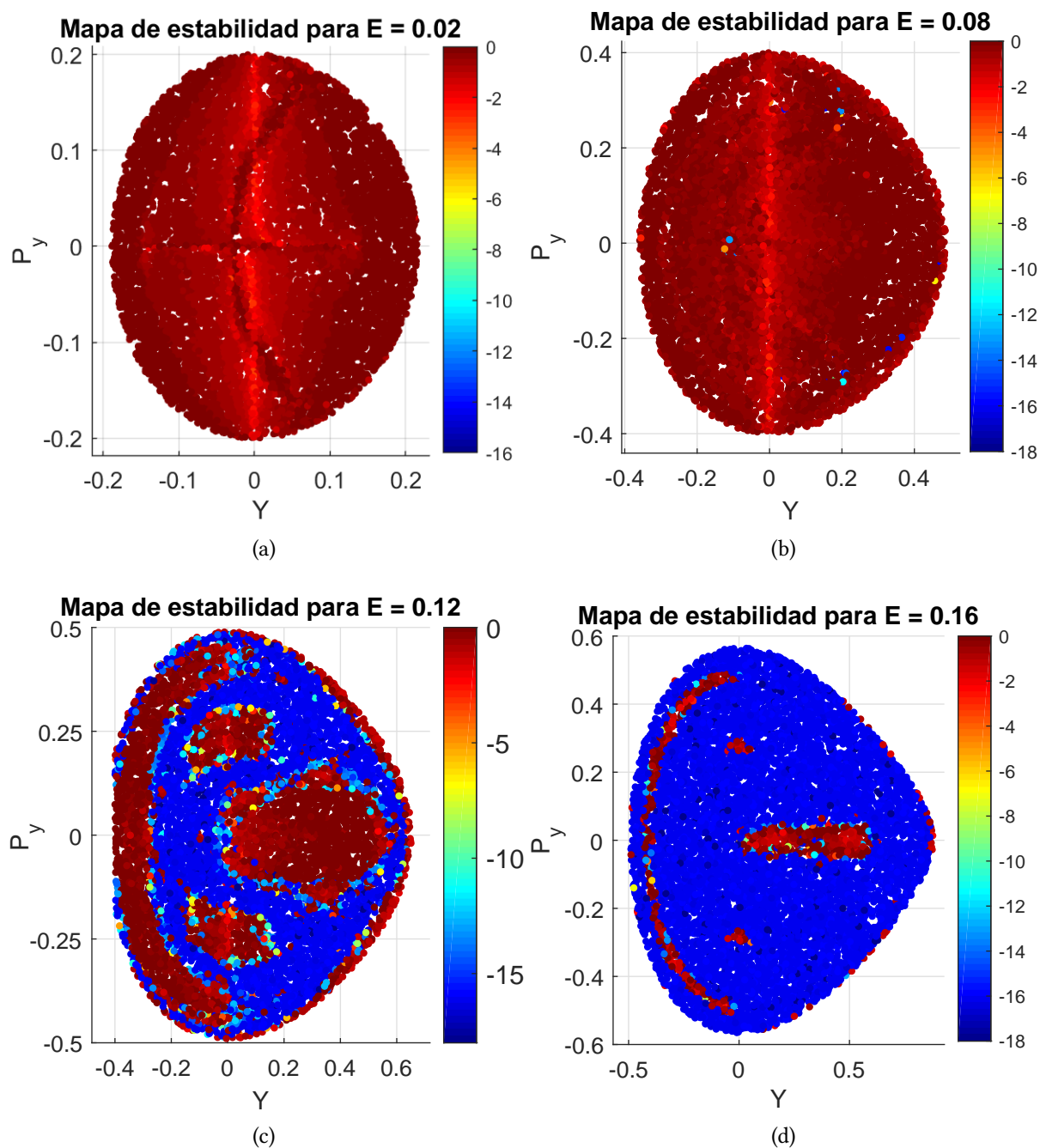


Figura 3.16: Mapas de estabilidad para diversos valores de la energía. La escala de color representa el valor límite de $\log_{10} \text{SALI}$ para cada una de las condiciones iniciales, y está estandarizada para todas las gráficas

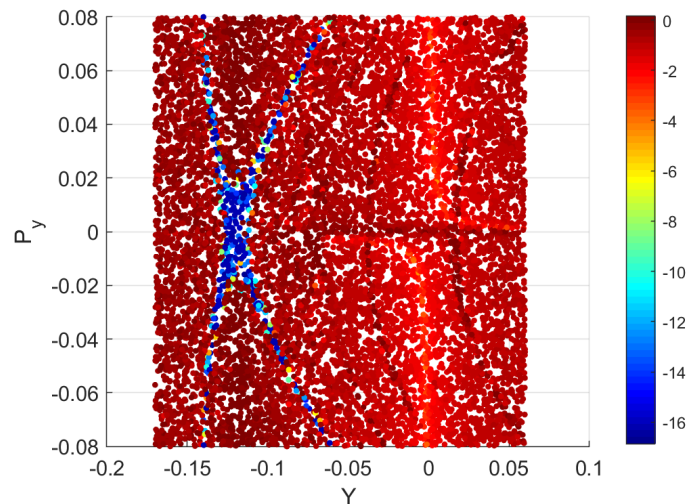


Figura 3.17: Detalle del mapa de estabilidad en torno a una autointersección de la separatriz señalada en la figura 3.8 ($E = 1/12$). Puede comprobarse que el caos emerge en torno a dicha región por la aparición de puntos de tono azulado

Podemos comprobar que el resultado obtenido es concordante con lo que ya observábamos en la figura 3.9, y claramente nos demuestra que en torno a las autointersecciones de una separatriz emerge el caos.

Para las gráficas correspondientes a energías $E = 0,12$ y $E = 0,16$, el resultado es también el esperado⁸, y concuerda con lo que mostramos en la sección anterior. Para estos valores de E la perturbación es lo suficientemente intensa como para que gran parte del área accesible sea cubierta por el mar caótico. Las zonas teñidas de color rojo se corresponden con las islas de estabilidad que observábamos en la sección anterior. Para $E = 0,12$, en torno al “islote principal” se ven de nuevo algunos “islotos secundarios” a los que les corresponden valores menores del SALI. Observamos así que esas islas que se van replicando por autosimilitud en torno a los puntos fijos estables son a su vez regiones estables, aunque en menor grado que la isla principal.

Para finalizar con el análisis de nuestro modelo, estudiaremos con más detalle cómo evoluciona el área ocupada por órbitas regulares en el plano (y, p_y) conforme la energía del sistema aumenta. Dicho análisis ya fue introducido por Hénon y Heiles en su artículo pionero [14], para el que es completamente necesario disponer de indicadores numéricos del caos. Nosotros emplearemos para dicho análisis el SALI en lugar del que utilizaron los autores citados⁹, revisando así los resultados que ellos mostraron con nuevas técnicas. Representamos en la figura 3.18 la proporción de órbitas regulares en el plano (y, p_y) frente a la energía del sistema.

⁸Hemos usado, de hecho, la gráfica correspondiente a $E = 0,12$ como herramienta de cotejo con los resultados aportados por Zotos en la referencia [33], para verificar que los resultados que hemos ido obteniendo a lo largo de nuestra investigación iban en buena dirección.

⁹Mientras que el SALI estudia la evolución de una pareja de vectores tangentes, el parámetro introducido por Hénon y Heiles tiene en cuenta cómo evoluciona la distancia entre dos puntos arbitrarios en cada iteración.

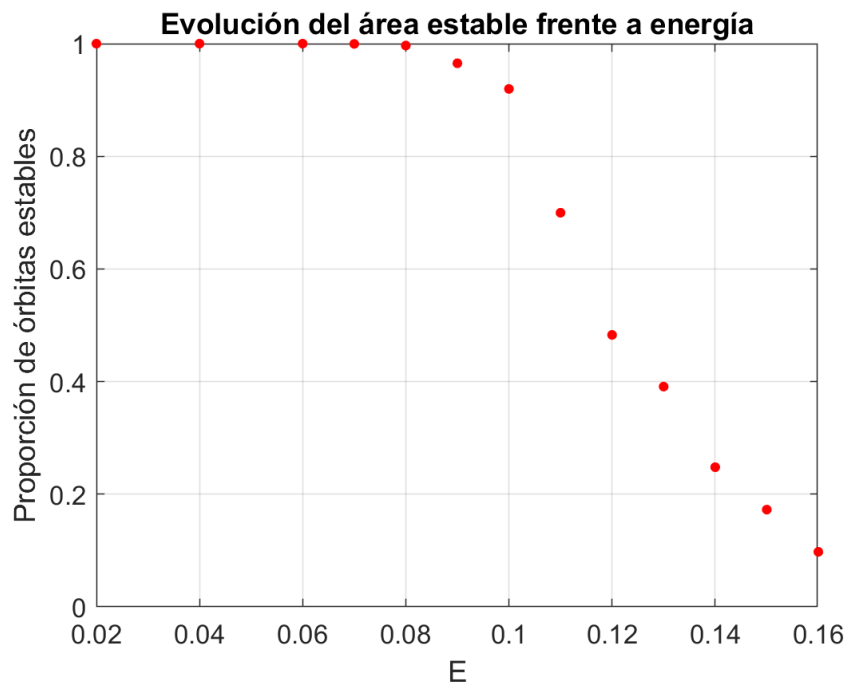


Figura 3.18: Proporción de órbitas estables con condiciones iniciales en el plano (y, p_y) ($x_0 = 0$) frente a la energía del sistema. Para perturbaciones pequeñas dicha proporción es del 100 %, y esta va disminuyendo a partir de un determinado valor crítico (en torno a $E = 0,08$)

Observamos claramente que por encima de un determinado valor de la energía (en torno a $E = 0,08$) la regularidad domina todo el plano (y, p_y) . Para energías mayores, el área cubierta por curvas regulares disminuye rápidamente. Obtenemos una tendencia muy similar a la presentada por Hénon y Heiles en [14].

Conclusiones

El modelo que hemos analizado a lo largo de estas páginas ha sido objeto de intensos estudios desde que Hénon y Heiles lo introdujeron en el artículo [14]. Aunque pudiera parecer que revisiones posteriores no aportan aspectos novedosos al estado de la cuestión, el propio hecho de conocer el sistema en profundidad propicia su análisis para proponer y mejorar otras técnicas que aplicar a sistemas aún sin estudiar. El caos es, de hecho, una cualidad ubicua en la teoría de ecuaciones diferenciales (aunque más pueda parecer un simple tema típico de divulgación científica), teniendo repercusiones directas en el comportamiento de aquellos sistemas caracterizados por él.

Tras el desarrollo de las principales ideas durante este trabajo, podemos concluir lo siguiente:

- Hemos estudiado con mucho detalle la aparición del caos en nuestro sistema hamiltoniano. Hemos comprobado también que el Teorema KAM se verifica cuando la perturbación es poco intensa, lo que garantiza la robustez de los sistemas integrables ante desviaciones de la regularidad lo suficientemente pequeñas. De hecho, a la vista de la figura 3.18, observamos que el modelo de Hénon-Heiles es bastante robusto en este aspecto, ya que para valores de $E \approx 0,12$ aún la mitad de la región accesible está ocupada por órbitas regulares (recordamos que la energía máxima para que las órbitas sean acotadas es $E = 0,166$).
- También hemos estudiado en profundidad cómo aparece el caos al perturbar un determinado sistema conservativo, integrable y regular. Dado que este es especialmente sensible a las técnicas numéricas empleadas para su estudio, debemos prestar particular atención a este aspecto. Uno de los puntos fundamentales que hemos comprobado es que los esquemas Runge-Kutta tradicionales no son adecuados para estudiar el caos en sistemas hamiltonianos, ya que dichos integradores no respetan una propiedad tan básica como es la conservación de la energía.
- Una vez elegido el algoritmo adecuado para resolver las ecuaciones de movimiento, lo siguiente que abordamos en el trabajo es la elección de indicadores numéricos adecuados, robustos y eficientes en el cálculo. Hemos comprobado también que las mejoras introducidas por el *Smallest Alignment Index* son notables en los tres aspectos antes señalados, proporcionando resultados coherentes con otros indicadores tradicionalmente utilizados

(exponentes de Lyapunov o espectros de las señales) y mostrándose eficaces cuando estos no proporcionaban resultados concluyentes.

El caos marca límites serios a la hora de conocer la evolución de aquellos sistemas en los que está presente. Por una parte, la fuerte dependencia de las condiciones iniciales impide la reproducibilidad de los experimentos, ya que es imposible replicar dos situaciones con total exactitud. Por otra parte, esta dependencia solamente nos garantiza la predicción (con relativo buen acuerdo) de la evolución del sistema para cortos intervalos de tiempo, como claramente ocurre en meteorología.

Este impedimento a la hora de conocer la realidad favorece el uso de disciplinas como la estadística para abordar el comportamiento de los sistemas caóticos. Aunque sabemos que dicha evolución es puramente determinista, nos es más sencillo tratar su comportamiento como un suceso aleatorio, ocultando tras la probabilidad nuestra impotencia por no adecuarse estos a la clásica concepción mecanicista del Universo.

Para terminar, me gustaría añadir una reflexión acerca de la transición hacia el caos estudiada para el modelo de Hénon y Heiles. Hemos observado cómo para valores pequeños de la perturbación la regularidad gobierna todo el espacio fásico accesible, y conforme esta aumenta el mar caótico va inundando aquellas zonas situadas entre las islas regulares supervivientes.

Teniendo en cuenta que muchos sistemas resultan ser una perturbación de un sistema integrable, podemos plantearnos dos cuestiones: ¿son todos estos sistemas regulares por defecto, y el caos es introducido en su dinámica una vez se activa la perturbación?; o, por el contrario, ¿es el caos una cualidad inherente también a los sistemas regulares, aunque sólo pueda manifestarse bajo la acción de la perturbación? Aunque en la práctica ambas consideraciones sean equivalentes, pudiendo parecer incluso un mero juego de palabras, considero que estos interrogantes cuestionan seriamente esa concepción de regularidad y perfección que tan interiorizada tiene la cultura occidental desde los tiempos de la Grecia Clásica.

¿Vive el caos reprimido bajo la belleza del movimiento de la Tierra alrededor del Sol? ¿O, como bien creía Pitágoras acerca de la existencia de los irracionales, el caos es un defecto de la naturaleza, que por definición debe ser perfecta? Quizás las respuestas a estos interrogantes precisen redefinir qué entendemos por conceptos tan básicos como “orden” o “belleza”. Quizás, como afirma José Saramago en *El hombre duplicado*, “el caos es orden aún por descifrar”.

Bibliografía

- [1] V. I. Arnold. *Mathematical methods of classical mechanics*. 2a ed. Springer-Verlag, 1989.
- [2] G. Benettin y col. «Lyapunov characteristic exponents for smooth dynamical systems and for Hamiltonian systems: a method for computing all of them. Part 1: Theory». En: *Meccanica* 15 (1980), págs. 9-20. DOI: [10.1007/BF02128236](https://doi.org/10.1007/BF02128236).
- [3] G. Benettin y col. «Lyapunov characteristic exponents for smooth dynamical systems and for Hamiltonian systems: a method for computing all of them. Part 2: Numerical application». En: *Meccanica* 15 (1980), págs. 21-30. DOI: [10.1007/BF02128237](https://doi.org/10.1007/BF02128237).
- [4] J. Berkovitz, R. Frigg y F. Kronz. «The ergodic hierarchy, randomness and Hamiltonian chaos». En: *Studies in History and Philosophy of Science Part B - Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 37.4 (2006), págs. 661-691. DOI: [10.1016/j.shpsb.2006.02.003](https://doi.org/10.1016/j.shpsb.2006.02.003).
- [5] J. Briggs y F. D. Peat. *El espejo turbulento - Los enigmas del caos y el orden*. Salvat Editores, 1994.
- [6] D. D. Carpintero y L. A. Aguilar. «Orbit classification in arbitrary 2D and 3D potentials». En: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 298.1 (1998), págs. 1-21. DOI: [10.1046/j.1365-8711.1998.01320.x](https://doi.org/10.1046/j.1365-8711.1998.01320.x).
- [7] M. Cencini, F. Cecconi y A. Vulpiani. *Chaos: from simple models to complex systems*. 1a ed. World Scientific, 2010.
- [8] P. J. Channell y C. Scovel. «Symplectic integration of Hamiltonian systems». En: *Nonlinearity* 3.2 (1990), pág. 231.
- [9] M. Cross. *Physics 161: Introduction to Chaos*. URL: http://www.cmp.caltech.edu/~mcc/Chaos_Course/Outline.html. (consultado: 20 de marzo de 2021).
- [10] D. Frenkel y B. Smit. *Understanding molecular simulation : from algorithms to applications*. Academic Press, 1996.
- [11] H. Goldstein, C. Poole y J. Safko. *Classical Mechanics*. 3a ed. Pearson Internacional, 2002.
- [12] E. Gover y N. Krikorian. «Determinants and the volumes of parallelotopes and zonotopes». En: *Linear Algebra and Its Applications* 433.1 (jul. de 2010), págs. 28-40. DOI: [10.1016/j.laa.2010.01.031](https://doi.org/10.1016/j.laa.2010.01.031).

- [13] E. Hairer, C. Lubich y G. Wanner. «Geometric numerical integration illustrated by the Störmer-Verlet method». En: *Acta numerica* 12 (2003), págs. 399-450.
- [14] M. Hénon y C. Heiles. «The applicability of the third integral of motion: some numerical experiments». En: *The Astronomical Journal* 69 (1964), pág. 73.
- [15] J. V. Jose y E. J. Saletan. *Classical dynamics: a contemporary approach*. Cambridge University Press, 2002.
- [16] J. Kadtke. «Special Edition of Los Alamos Science, 1987». En: *Los Alamos science / Los Alamos Scientific Laboratory Special Ed* (ene. de 1987), pág. 242.
- [17] C. Lanczos. *The variational principles of mechanics*. 4a ed. Dover, 1986.
- [18] J. L. Lebowitz y O. Penrose. «Modern ergodic theory». En: *Physics Today* 26.2 (feb. de 1973), págs. 23-29. DOI: [10.1063/1.3127948](https://doi.org/10.1063/1.3127948).
- [19] J. Masoliver y A. Ros. «Integrability and chaos: the classical uncertainty». En: *European journal of physics* 32.2 (2011), pág. 431.
- [20] R. I. McLachlan y P. Atela. «The accuracy of symplectic integrators». En: *Nonlinearity* 5.2 (1992), págs. 541-562. DOI: [10.1088/0951-7715/5/2/011](https://doi.org/10.1088/0951-7715/5/2/011).
- [21] E. Ott. *Chaos in dynamical systems*. 2a ed. Cambridge University Press, 2002.
- [22] J. Pöschel. «A lecture on the classical KAM theorem». En: *arXiv preprint arXiv:0908.2234* (2009).
- [23] W. H. Press. *Numerical recipes : the art of scientific computing*. 3rd. ed., 4th print. Cambridge University Press, 2017.
- [24] J. M. Sanz-Serna. «Runge-kutta schemes for Hamiltonian systems». En: *Bit* 28.4 (1988), págs. 877-883. DOI: [10.1007/BF01954907](https://doi.org/10.1007/BF01954907).
- [25] J. M. Sanz-Serna. «Symplectic Runge-Kutta and related methods: recent results». En: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 60.1-4 (1992), págs. 293-302. DOI: [10.1016/0167-2789\(92\)90245-I](https://doi.org/10.1016/0167-2789(92)90245-I).
- [26] C. Skokos. «Alignment indices: A new, simple method for determining the ordered or chaotic nature of orbits». En: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 34.47 (2001), págs. 10029-10043. DOI: [10.1088/0305-4470/34/47/309](https://doi.org/10.1088/0305-4470/34/47/309).
- [27] C. Skokos y T. Manos. «The Smaller (SALI) and the Generalized (GALI) Alignment Indices: Efficient Methods of Chaos Detection». En: *Chaos Detection and Predictability. Lecture Notes in Physics*. Vol. 915. Springer, Berlin, Heidelberg, 2016. DOI: [10.1007/978-3-662-48410-4_5](https://doi.org/10.1007/978-3-662-48410-4_5).
- [28] C. Skokos y col. «How Does the Smaller Alignment Index (SALI) Distinguish Order from Chaos?». En: *Progress of Theoretical Physics Supplement* 150.150 (2003), págs. 439-443. DOI: [10.1143/PTPS.150.439](https://doi.org/10.1143/PTPS.150.439). arXiv: [0301035](https://arxiv.org/abs/0301035) [nlin].

-
- [29] «Small denominators and problems of stability of motion in classical and celestial mechanics». En: *Collected Works: Representations of Functions, Celestial Mechanics and KAM Theory, 1957–1965*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2009, págs. 306-412. DOI: [10.1007/978-3-642-01742-1_23](https://doi.org/10.1007/978-3-642-01742-1_23).
- [30] G. Teschl. *Ordinary differential equations and dynamical systems*. 1a ed. American Mathematical Society, 2012.
- [31] M. Toda, N. Saito y R. Kubo. *Statistical Physics I: Equilibrium Statistical Mechanics*. 2nd. ed. Springer-Verlag, 1995.
- [32] L. W. Tu. *An Introduction to Manifolds*. 2nd ed. Springer New York, 2011.
- [33] E. Zotos. «Classifying orbits in the classical Hénon–Heiles Hamiltonian system». En: *Non-linear Dynamics* 79.3 (2014), págs. 1665-1677. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11071-014-1766-6>.

Anexo I: Algoritmo de Verlet para sistemas hamiltonianos

En este anexo, mostraremos y justificaremos el carácter simpléctico del algoritmo de Verlet que introdujimos en la sección 2.1, siguiendo los pasos de la referencia [10]. Consideremos un sistema hamiltoniano cuya hamiltoniana asociada es de la forma:

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^n \frac{p_j^2}{2m_j} + V(\mathbf{q}) \quad (3.1)$$

y sea $f(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ una función dinámica que no dependa explícitamente del tiempo. En este caso, según la Proposición 1 la evolución de la misma a lo largo de los puntos de una determinada órbita $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ vendrá gobernada por la siguiente ecuación funcional:

$$\frac{df}{dt} = \mathcal{L}f \quad (3.2)$$

con $\mathcal{L} = \{\cdot, \mathcal{H}\}$ el conocido como *operador de Liouville*. Dicha ecuación se puede resolver formalmente:

$$f(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) = \exp(\mathcal{L}t)f(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)) \quad (3.3)$$

El operador \mathcal{L} se puede separar en los sumandos:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_q + \mathcal{L}_p, \text{ siendo } \mathcal{L}_q = \sum_{j=1}^n \dot{q}_j(0) \frac{\partial}{\partial q_j} \quad \mathcal{L}_p = \sum_{j=1}^n \dot{p}_j(0) \frac{\partial}{\partial p_j} \quad (3.4)$$

(hemos hecho uso de las ecuaciones (1.2) implícitamente). De este modo, la acción del opera-

dor $\exp(\mathcal{L}_q t)$ sobre $f(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0))$ resulta ser:

$$\begin{aligned} \exp(\mathcal{L}_q t) f(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)) &= \sum_{m \geq 0} \frac{t^m}{m!} \left(\dot{q}_j(0) \frac{\partial}{\partial q_j} \Big|_{t=0} \right)^m f(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)) \\ &= \sum_{m \geq 0} \frac{t^m}{m!} \frac{d}{dt} t^m f(\mathbf{q}(0) + t \dot{\mathbf{q}}(0), \mathbf{p}(0)) \Big|_{t=0} = f(\mathbf{q}(0) + t \dot{\mathbf{q}}(0), \mathbf{p}(0)) \end{aligned}$$

Es decir, el operador $\exp(\mathcal{L}_q t)$ evoluciona únicamente las coordenadas espaciales, tomando como vector desplazamiento la velocidad en el instante inicial. Del mismo modo, puede obtenerse que la acción de $\exp(\mathcal{L}_p t)$ sobre $f(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0))$ resulta:

$$\exp(\mathcal{L}_p t) f(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)) = f(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0) + t \dot{\mathbf{p}}(0))$$

Dado que los operadores \mathcal{L}_q y \mathcal{L}_p no conmutan, la igualdad $\exp(\mathcal{L} t) = \exp(\mathcal{L}_q t) \exp(\mathcal{L}_p t)$ no será válida. Sin embargo, sí será válida la conocida como *identidad de Trotter*:

$$\exp(\mathcal{L} t) = \lim_{m \rightarrow \infty} \left[\exp(\mathcal{L}_p t/2M) \exp(\mathcal{L}_q t/M) \exp(\mathcal{L}_p t/2M) \right]^M \quad (3.5)$$

Si m es grande pero finito, podemos entender el cociente t/m como el paso de nuestro integrador numérico, que denotaremos por k como viene siendo usual. Además, bajo dicho supuesto:

$$\exp(\mathcal{L} t) \approx [\exp(\mathcal{L}_p k/2) \exp(\mathcal{L}_q k) \exp(\mathcal{L}_p k/2)]^M =: T_k^M \quad (3.6)$$

El operador T_k puede entenderse como el operador de evolución aproximado con paso temporal k pequeño, y su efecto sobre una función dinámica es:

$$\begin{aligned} T_k f(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) &= [\exp(\mathcal{L}_p k/2) \exp(\mathcal{L}_q k)] f \left(q_j(t), p_j(t) + \frac{k}{2} F_j(t) \right) = \\ &= \exp(\mathcal{L}_p k/2) f \left(q_j(t) + k \frac{p_j(t)}{m_j} + \frac{k^2}{2m_j} F_j(t), p_j(t) + \frac{k}{2} F_j(t) \right) = \\ &= f \left(q_j(t) + k \frac{p_j(t)}{m_j} + \frac{k^2}{2m_j} F_j(t), p_j(t) + \frac{k}{2} (F_j(t) + F_j(t+k)) \right) =: f(\mathbf{q}(t+k), \mathbf{p}(t+k)) \quad (3.7) \end{aligned}$$

donde $F_j(t) = -\frac{\partial V}{\partial q_j}$. Con el desarrollo anterior, hemos obtenido de forma aproximada la evolución temporal de las coordenadas $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ bajo la acción de la dinámica entre los instantes de tiempo t y $t+k$, donde el valor de las coordenadas en este nuevo instante de tiempo serán los puntos $(\mathbf{q}(t+k), \mathbf{p}(t+k))$ del desarrollo anterior. Puede comprobarse que dichos puntos coinciden con las ecuaciones del algoritmo de Verlet expuestas en la ecuación (2.1).

Anexo II: Código MATLAB empleado

```
function [QP,ss,SALI,spos,spneg,h,fs,P1x,P1y] = henonSolver(x0,y0,py0,E,k,N)

% [QP,ss,SALI,spos,spneg,h,fs,P1x,P1y] = henonSolver(x0,y0,py0,E,k,N)
% solves the equations of motion of the Henon-Heiles model with a
% symplectic algorithm of order 3, extracted from the reference [1].
%
% It also provides, for the initial conditions specified, a vector with
% Small Alignment Indices (SALI, [2]), a vector with Poincare section
% points (direct and inverse) and the Fourier transform of x(t) and y(t)
% signals.
%
% INPUT ARGUMENTS:
% * Initial conditions: x0, y0, py0.
% * System energy: E.
% * Time step: k. By default, k = 0.01.
% * Number of iterations: N. By default, N = 1e6.
%
% OUTPUT ARGUMENTS:
% * QP is a Nx4 matrix where the evolution of x(t), y(t), px(t) and py(t)
%   is stored: QP = [x y px py].
% * (ss,SALI) corresponds to SALI(t), where t <- ss (we used a 4th order RK
%   scheme of time step 2k to solve the associated differential system).
% * spos and spneg correspond to the points in the Poincare section x=0.
% * h is the energy vector, evaluated in each of the points calculated.
% * (fs,P1x) and (fs,P1y) are the Fourier transforms of x and y signals
%   evaluated at the frequencies fs.
%
% This script is part of the Final Degree Project 'Chaos in Hamiltonian
% systems' (University of Seville), by Miguel Ibanez Garcia (2021).
%
% REFERENCES:
% [1] R I McLachlan and P Atela 1992 Nonlinearity 5 541.
```

```

% [2] arXiv:1502.02510 [nlin.CD].

%% Henon-Heiles model
% H = (px^2 + py^2)/2 + (x^2 + y^2)/2 + yx^2 - y^3/3
V = @(x,y) (x.^2 + y.^2)/2 + y.*(x.^2) - y.^3/3;

%% Parametres
% Symplectic scheme parametres
a1 = 0.919661523017399857;
a2 = 1/(4*a1) - a1/2;
a3 = 1-a1-a2;

b1 = a3; b2 = a2; b3 = a1;

a = [a1 a2 a3]; b = [b1 b2 b3];

clear a1 a2 a3 b1 b2 b3

% Initial conditions
px0 = sqrt(2*(E - V(x0,y0)) - py0^2);

%% Numerical resolution
if nargin<5
    k = 0.01;
    N = 1e6;
end

QP = zeros(N,4); % [x y px py]
QP(1,:) = [x0 y0 px0 py0];

l = 4; %Intermediate steps, counting initial point
QP_i = zeros(1,4);
QP_i(1,:) = [x0 y0 px0 py0];

sppos = zeros(N,2); %Initializing Poincare section (positive way)
spneg = zeros(N,2); %Initializing Poincare section (negative way)
i = 1;

%Initializing energy conservation checker
h = zeros(1,N);
h(1) = E;

```

```

% Initializing SALI
SALI = zeros(floor(N/2) - 1,1);
SALIlast = 1.4142; % Initial SALI, sqrt(2)

W1 = [1;0;0;0];
W2 = [0;1;0;0];

ftg = @(w,x,y) [0      0      1 0;...
                0      0      0 1;...
                -1-2*y  -2*x   0 0;...
                -2*x    2*y-1  0 0] * w;

tic % How much time is it needed?

% for loop
for t=1:N-1
    for j=1:l-1
        x = QPi(j,1);
        y = QPi(j,2);
        px = QPi(j,3);
        py = QPi(j,4);

        QPi(j+1,3) = px - k*b(j)*x*(1+2*y);
        QPi(j+1,4) = py + k*b(j)*(y^2 - y - x^2);

        PX = QPi(j+1,3);
        PY = QPi(j+1,4);

        QPi(j+1,1) = x + k*a(j)*PX;
        QPi(j+1,2) = y + k*a(j)*PY;
    end

    x = QPi(1,1);
    y = QPi(1,2);
    py = QPi(1,4);

    X = QPi(1,1);
    Y = QPi(1,2);
    PX = QPi(1,3);

```

```

PY = QPi(1,4);

QP(t+1,:) = [X Y PX PY];
QPi(1,:) = [X Y PX PY];

% PS, positive way
if x<0 && X>0
    sptos(i,:) = [y py];
    i=i+1;
end

% PS, negative way
if x>0 && X<0
    spneg(i,:) = [y py];
    i=i+1;
end

% Is energy conserved?
h(t+1) = V(X,Y) + 0.5*(PX^2+PY^2);

% SALI loop
if (mod(t,2)==0 && SALIlast > 1.d-16) % Here t=1 indexes the first
                                        % point after initial condition

    xant = QP(t-1,[1 2]);
    xmed = [x y];
    xpos = [X Y];

    k1_1 = 2*k*ftg(W1,xant(1),xant(2));
    k1_2 = 2*k*ftg(W2,xant(1),xant(2));

    k2_1 = 2*k*ftg(W1 + 0.5*k1_1,xmed(1),xmed(2));
    k2_2 = 2*k*ftg(W2 + 0.5*k1_2,xmed(1),xmed(2));

    k3_1 = 2*k*ftg(W1 + 0.5*k2_1,xmed(1),xmed(2));
    k3_2 = 2*k*ftg(W2 + 0.5*k2_2,xmed(1),xmed(2));

    k4_1 = 2*k*ftg(W1 + k3_1,xpos(1),xpos(2));
    k4_2 = 2*k*ftg(W2 + k3_2,xpos(1),xpos(2));

```

```
W1 = W1 + k1_1/6 + k2_1/3 + k3_1/3 + k4_1/6;
W2 = W2 + k1_2/6 + k2_2/3 + k3_2/3 + k4_2/6;

% SALI
W1 = W1/norm(W1);
W2 = W2/norm(W2);

SALIlast = min(norm(W1+W2),norm(W1-W2));
SALI(t/2) = SALIlast;
end
end

toc

clear QPi PX px PY py x y X Y

%% In which time instants is SALI evaluated?
ss = 2*k:2*k:(floor(N/2) - 1)*2*k;

%% Frequency spectra (extracted from MATLAB Help)
% Frequency sampling
fs = (1/k)*(0:(N/2))/N; % We choose period equals k

% Bilateral and unilateral spectra
P2x = abs(fft(QP(:,1))/N);
P1x = P2x(1:N/2+1);
P1x(2:end-1) = 2*P1x(2:end-1);

P2y = abs(fft(QP(:,2))/N);
P1y = P2y(1:N/2+1);
P1y(2:end-1) = 2*P1y(2:end-1);

end
```