1 Mecánica Clásica

Los sistemas hamiltonianos difieren radicalmente de los ya vistos sistemas disipativos. La diferencia está en que los sistemas hamiltonianos no hay atractores, ya que lo impide el teorema de Liouville.

En la *Formulación de Newton* tenemos

$$F = m\vec{a} = m\frac{\mathrm{d}^2\vec{x}}{\mathrm{dt}^2} \qquad \text{para } m = cte \tag{1}$$

o bien

$$F = \frac{\mathrm{d}\vec{p}}{\mathrm{dt}} \qquad ; \vec{p} = m\vec{v} \tag{2}$$

Si existen ligaduras, la solución de estas ecuaciones no es directa y en general en estos casos es más simple utilizar la *Formulacion Lagrangiana* según la cual las ecuaciones fundamentales son

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right) = 0 \qquad\qquad i = 1, ..., N \tag{3}$$

donde q_i son las coordenadas generalizadas, y $L(\overrightarrow{q}, \dot{\overrightarrow{q}}, t) = T - V$ es la lagrangiana del sistema.

También puede utilizarse la *Formulación* alternativa de *Hamilton* en la que las coordenadas son q_i y p_i , donde p_i son los momentos generalizados; $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$. Luego las ecuaciones de movimioento son

$$q_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{4}$$

$$p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{5}$$

donde $H(\overrightarrow{q}, \overrightarrow{p}, t) = \sum_i q_i p_i - L(\overrightarrow{q}, \overrightarrow{p}, t)$ es el hamiltoniano del sistema.

Lamaremos espacio de configuraciones $(\vec{q})$ al espacio formado por las coordenadas generalizadas y *espacio de fases* $(\vec{p}, \vec{q})$ al espacio formado por las coordenadas generalizadas y los momentos generalizados.

La evolución temporal del punto $(\vec{p}(0), \vec{q}(0))$ es lo que se llama trayectoria en el espacio de fases.

Si el hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo el sistema se llama conservativo y la energía es una constante de movimiento: $H(\vec{p}, \vec{q}) = E$

Vamos a estudiar la *estructura del espacio de las fases* de los sistemas hamiltonianos en los siguientes casos:

1) Sistemas de un grado de libertad: Péndulo simple.
2) Sistemas de dos grados de libertad: Superficie de Sección de Poincaré (SSP); Régimen regular, Régimen caótico.
3) Sistemas de más de dos grados de libertad.
4) Sistemas genéricos: Péndulo doble, Vibraciones de la molécula LiCN.

2 Sistema de un grado de libertad

En este tipo de sistemas el espacio de fases tiene dimensión 2 por lo que puede visualizarse su dinámica en una representación (p,q).

Al ser un sistema hamiltoniano existe una constante de movimiento, la energía E, y por lo tanto la dinámica tiene lugar en una variedad de dimensión 1.

El ejemplo típico es el péndulo simple, cuyo hamiltoniano es

$$H = \frac{p^2}{2ml^2} - mgl\cos(\phi) \tag{6}$$

gráfico

Éste péndulo puede describir dos tipos de movimientos:

I) Vibraciones alrededor de la posición de equilibrio (circunsferencias en el espacio de fases).

II) Rotaciones alrededor del punto de pivote. Esto ocurre cuando la energía es mayor a mgl (olas sobre los círculos).

Los puntos de equilibrio son las posiciones correspondientes al péndulo alineado con la vertical. Si la masa queda abajo es un punto de equilibrio estable llamado punto fijo elíptico (puntos dentro de las circunsferencias), si la masa queda arriba es un punto de equilibrio inestable llamado punto hiperbólico (puntos entre las líneas de puntos).

3 Sistemas de dos grados de libertad

En estos sistemas el espacio de fase tiene dimensión 4 por lo que la dinámica del sistema tiene lugar en una variedad de dimensión 3. Una forma conveniente de visualizar la dinámica es mediante la *Superficie de Sección de Poincaré (SSP)* que consiste en obtener la intersección de la trayectoria con un plano arbitrario cada vez que la trayectoria se cruza en un determinado sentido.

A partír de $(p_1(0), q_1(0))$ se obtiene $(p_1(1), q_1(1))$, y a partír de éste $(p_1(2), q_1(2))$, y así sucesivamente, por lo que obtenemos un mapa $x_{n+1} = Tx_n$.

Para sistemas conservativos, el mapa de Poincaré conserva el área, ya que cumple la ecuación de Liuville.

A partír de la SSP se puede obtener información del régimen dinámico, regular o caótico, al que está sujeto nuestro sistema.

3.1 Régimen caótico.

En este caso el movimiento tiene lugar en un espacio de fase de dimensión 3 de forma que las sucesivas iteraciones de la trayectoria con la SSP irán llenando un área. Así, cualquier trayectoria del sistema pasará arbitrariamente cerca de cualquier punto del espacio de fases permitido por la condición de conservación de la energía.

Se dice entonces que el movimiento del sistema es *ergódico*. Coincidiendo entonces los promedios temporales con los promedios en el espacio de fases. De forma que se puede aplicar la mecánica estadística a su estudio.

3.2 Régimen regular

Cuando existen tantas variables independientes como constantes de movimientos se dice que el sistema es *integrable* y que su movimiento es regular. Luego existe una transformación canónica $(\overrightarrow{p},\overrightarrow{q})\rightarrow(\vec{I},\overrightarrow{\theta})$ de forma que $E = H(\vec{I})$ (i.e. el hamiltoniano sólo depende de las acciones $\vec{I}$). Las ecuaciones de hamilton toman la forma

$$\dot{\theta}_i = \frac{\partial H}{\partial I_i} = \omega_i(\vec{I}) \Rightarrow \theta_i = \omega_i(\vec{I})t + \delta_i \tag{7}$$

$$\dot{I}_i = -\frac{\partial H}{\partial \theta_i} = 0 \Rightarrow I_i = cte \tag{8}$$

donde $\omega_i(\vec{I})$ son frecuencias características del movimiento.
Ejemplo: Dos osciladores armónicos desacoplados.

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + m_1\omega_1^2 q_1 + \frac{p_2^2}{2m_2} + m_2\omega_2^2 q_2 \tag{9}$$

$$q_i = \sqrt{\frac{2I_i}{m_i\omega_i}}\sin(\theta_i) \tag{10}$$

$$p_i = \sqrt{2m_i\omega_i I_i}\cos(\theta_i) \qquad i = 1,2 \tag{11}$$

$$H = I_1\omega_1 + I_2\omega_2 \tag{12}$$

3.2.1 Superficie de Sección de Poincaré en régimen regular

Las trayectorias en el espacio de fase en régimen regular están confinadas en una variedad de dimensión N que tiene la estructura topológica de un *toro*. Éste es invariante frente a la dinámica del sistema.

Dependiendo de la relación de frecuencias $\alpha = \frac{\omega_1}{\omega_2}$ tendremos dos casos para el movimiento:

I) α racional $\rightarrow \alpha = \omega\frac{r}{s} \rightarrow$ las frecuencias están en resonancia y la trayectoria en la superficie del toro al cabo de un número finito de vueltas se cierra sobre sí misma. En la SSP se encontrarán un número finito de puntos que son visitados periódicamente $\rightarrow$ Movimiento regular periódico.

gráfico de toroide con una curva que se cierra.

gráfico de espacio de fases: dos puntos

II) α irracional. Las trayectorias no se cierran y van cubriendo densamente todo el toro. La SSP es una linea cerrada $\rightarrow$ movimiento cuasiperiódico.

gráfico de toroide con una curva que va llenando la superficie del mismo.

gráfico de espacio de fases: un círculo.

3.2.2 Ejemplos de sistemas integrables

1) Sistemas separables

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_i \tag{13}$$

2) Una partícula en un campo central
3) Billares circular, elíptico y poligonales con ángulos racionales
4) Retículo de Toda

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) + \exp(-(\theta_1 - \theta_2)) + \tag{14}$$

$$\exp(-(\theta_2 - \theta_3)) + \exp(-(\theta_3 - \theta_1)) - 3 \tag{15}$$

3.2.3 Ejemplos de sistemas totalmente caóticos

1) Movimiento libre en una superficie geodésica de curvatura negativa.
2) Billar de Sinai.
3) Estadio o billar de Bunimovitch.

4 Jerarquía del caos

En realidad el comportamiento ergódico es sólo el primer escalón dentro de lo que se denomina jerarquía del caos que comprende una serie de propiedades de los sistemas dinámicos, estructurada de tal forma que cada una de ellas implica a la anterior.

1) Sistemas ergódicos

2) Sistemas mezcladores. La dinámica de las trayectorias en el espacio de fases es análoga al proceso de mezcla de dos líquidos. En éstos sistemas está garantizado la evolución espontána hacia el equilibrio.

3) Sistemas K. Ejemplo: sistemas de esferas rígidas.

4) Sistemas de Bernoulli. En éstos la dinámica, a pesar de ser toalmente determinista, es indistinguible a los resultados que se producen en una ruleta.

Hemos visto cual es la estructura del espacio de fases en los casos extremos:
- Sistemas completamente integrables
- Sistemas completamente caóticos.

¿En cuál de éstas dos categorías se encuadran los hamiltonianos correspondientes a sistemas típicos de interés en física?

La respuesta la tendremos mediante la *experimentación*, que consiste en simulaciones con ordenadores, efectuando integración numérica de las ecuaciones de movimiento de las ecuaciones de hamilton de los siguientesn casos:

1) Hamiltoniano de Henon-Heiles

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}(q_1^2 + q_2^2) + q_1^2 q_2 - \frac{1}{3}q_2^3 \tag{16}$$

gráfico de SSP compuestas.

2) Mapa de Henon-Siegel (sistema hamiltoniano que es discreto)

$$p_{n-1} = p_n \cos(\alpha) - (q_n - p_n^2) \sin(\alpha) \tag{17}$$
$$p_{n-1} = p_n \sin(\alpha) - (q_n + p_n^2) \cos(\alpha) \tag{18}$$

3) Mapa estandar de Chirikov

$$p_{n-1} = p_n + k \sin(\theta_n) \tag{19}$$
$$\theta_{n+1} = \theta_n + p_{n+1} \tag{20}$$

simulación para distintos valores del parámetro k.

5 Hamiltonianos Genéricos

Llamaremos hamiltoniano genérico a

$$H = H_0 + \varepsilon V \tag{21}$$

donde H_0 corresponde a un sistema integrable, V a la perturbación y ε es el grado de perturbación.

La estructura de Hamiltonianos genéricos puede explicarse mediantes 2 teoremas:
1) Teorema de Poincaré- Birkhoff
2) Teorema de Kam

5.1 Teorema de Kam

En un sistema ligeramente perturbado sólo sobreviven aquellos toros "suficientemente irracionales".

Para un sistema con dos grados de libertad, el teorema toma la forma

$$\left|\frac{\omega_1}{\omega_2} - \frac{r}{s}\right| > \frac{k(\varepsilon)}{s^{5/2}} \quad \text{, para todo } r, s \tag{22}$$

donde $k(\varepsilon)$ es una función que depende del grado de perturbación.

Estos toros se distorsionan pero no se destruyen y se les da el nombre de TOROS DE KAM.

El resto de los toros se destruyen, pero por dos mecanismos diferentes:

1) Toros con α racional, evidentemente no cumplen la relación anterior y se destruyen todos, pero sobreviven $2ks$ $(k = 1, 2, ..)$ puntos fijos de un círculo racional con $\alpha = r/s$ .La mitad son elípticos (estables) y la otra mitad hiperbólicos (inestables) $\rightarrow$ Teorema de Poincaré-Birkhoff.

Si consideramos un toro cuyo α es racional, lo que nos dice el teorema de Poincaré-Birchoff es que por efecto de la perturbación dará lugar a un conjunto de puntos fijos elípticos y al mismo número de puntos hiperbólicos. Ahora bien, alrededor de los puntos elípticos aparecerán toros que algunos de ellos tendrán un α racional y, por lo tanto, se volverá a aplicar éste teorema, y así sucede ad infinitum.

2) Toros cuyas α no es "suficientemente irracional" resultan destruidas por la perturbación dando lugar a conjuntos invariantes que reciben el nombre de CANTOROS. Su naturaleza se entiende bien utilizando la SSP.

CANTOROS: órbitas cuasiperiódicas similar a los toros normales, pero a diferencia de éstos no llenan una linea en la superficie de sección de Poincaré, sino sólo un objeto FRACTAL, que es un conjunto de CANTOR. Este conjunto, como ya vimos en la lección anterior, se puede visualizar como una linea a la que le faltan infinitos segmentos de tal forma que su dimensión está comprendida entre 0 y 1.

A diferencia con lo que ocurre con los toros invariantes que no pueden ser cruzados por ninguna trayectoria, los cantoros solo presentan, debido a su naturaleza, barreras parciales para el flujo de las trayectorias a su través. Estas barreras están mas o menos destruidas en función del grado de perturbación y de su grado de irracionalidad de forma que el flujo total en estas regiones está controlado por el cantoro más intacto que actúa como *cuello de botella* para el flujo de trayectorias a su través. Este cantoro será el último toro kam destruido, que corresponderá a aquel que tenga un α "lo más irracional posible". Para ver cual es éste número utilizaremos la teoría de frcciones continuas.

5.1.1 Teoría de fracciones continuas

La expresión

$$\alpha = a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \ldots}}} \quad ; \; a_0 \in Z, \quad a_1, a_2, ... \in N \tag{23}$$

es la mejor forma de aproximar el número irracional α, en el sentido de que las aproximaciones racionales $\frac{r_n}{s_n}$ que se obtienen por truncación de ella en a_n, son mejores aproximación a α que cualquier $\frac{r}{s}$ con $s \leq s_n$.

El "α más irracional posible" será aquel cuya fracción continua converja más lentamente, i.e. aquella en que todos los $a_i = 1$. El número

$$\gamma = \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \ldots}}} \tag{24}$$

$$\gamma = \frac{1}{1+\gamma} \Rightarrow \gamma = \frac{-1+\sqrt{5}}{2} = 0.618033989... \tag{25}$$

se conoce como Media Aurea.

6 Sistemas de más de 2D

Para sistemas de 2 grados de libertad hemos visto que la existencia de toros invariantes tiene un efecto drástico en la estructura del espacio de fases, ya que lo estratifica al dividirlo en dos zonas inconexas; la de dentro del toro y la de fuera.

Para sistemas con más de 2 grados de libertad ($N > 2$) esto no es así, ya que el espacio de fases tiene dimensión $2N - 1$ y los toros tienen dimensión N (una superficie de dimension N no define dos regiones inconexas en un espacio de dimensión $2N - 1$).

Así, aunque existan zonas de régimen regular, las zonas caóticas del sistema estarán interconectadas constituyendo lo que se llama Red de Arnold. Una sóla trayectoria podrá recorrer toda la zona caótica, dando lugar a lo que se llama Difusión de Arnold.

Ejemplos de sistemas genéricos 2D

-Péndulo doble

-Vibraciones de la molécula Li-CN

6.1 Péndulo doble

La lagrangiana de este sistema es

$$L = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)I_1^2\dot{\phi}^2 + \frac{1}{2}m_2 I_2^2\dot{\psi}^2 + \tag{26}$$

$$m_2 I_1 I_2 \dot{\phi}\dot{\psi}\cos(\psi - \phi) - (m_1 + m_2)gI_1(1 - \cos(\phi)) - \tag{27}$$

$$m_2 g I_2(1 - \cos(\psi)) \tag{28}$$

Vamos a estudiar la dinámica del sistema obteniendo la SSP donde el plano elegido será $\psi = 0$, se cumple que $\dot{\psi} + \lambda\cos(\psi) > 0$. Esto es equivalente a pedir que el momento conjugado $P_\psi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = m_2 I_2^2 \dot{\psi} + m_2 I_1 I_2 \dot{\phi}\cos(\psi - \phi) > 0-$

Casos extremos:

$l_1 <<$ $\rightarrow$ péndulo simple de masa m_2

$l_2 <<$ $\rightarrow$ péndulo simple de masa $m_2 + m_1$

$m_1 >> m_2$ $\rightarrow$ el péndulo 1 describe un movimiento armónico simple y el péndulo 2 describe un movimiento oscilatorio forzado periódicamente.

$E >>$ $\rightarrow$ dinámica dominada por la energía cinética $\rightarrow$ movimiento de rotación (equivalente a un péndulo situado horizontalmente).

Amplitud pequeña $\rightarrow$ movimiento de modos normales.

Experimentos en el laboratorio y en la computadora.

Quien desee ampliar este tema puede referirse a:

M. Toda, R. Kubo and N. Saitô

Statistical Physics I: Equilibrium Statistical Mechanics

Capitulo 5: Ergodic Problems.

Springer Verlag