



FACULTAD DE FÍSICA

GRADO EN FÍSICA

Trabajo de Fin de Grado

EL EXPERIMENTO DE
FERMI-PASTA-ULAM-TSINGOU

Simulación con interacciones no lineales

Autor:

Alejandro Mata Ali

Tutor:

José Manuel Sánchez de Santos

Área de Física Teórica, Departamento de Física de Partículas

Junio 2021

Resumen

- El objeto de este trabajo es el experimento de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou, realizado en 1953 con el objeto de aproximarse al estudio de los sistemas no lineales, modelizados en este caso por una cadena de osciladores armónicos acoplados mediante una interacción no lineal. Se trata probablemente de la primera simulación numérica de la historia de la física, que dio lugar a una increíble sucesión de aportaciones de relevancia tanto teóricas como experimentales en diversos campos.

Realizaremos un conjunto de simulaciones numéricas de la evolución del sistema como en el experimento original, visualizaremos e interpretaremos los resultados y los analizaremos desde el punto de vista teórico, lo cual nos servirá de introducción al estudio de la ecuación de KdV, la física de solitones y los sistemas integrables.

Resumo

- O obxecto deste traballo é o experimento de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou, realizado en 1953 co obxectivo de abordar o estudo dos sistemas non lineares, modelados neste caso por unha cadea de osciladores harmónicos acoplados mediante unha interacción non linear. Trátase probablemente da primeira simulación numérica da historia da física, que produciu unha incríbel sucesión de achegas de relevancia, tanto teóricas como experimentais, en diversos campos.

Realizaremos un conxunto de simulacións numéricas da evolución do sistema como no experimento orixinal, visualizaremos e interpretaremos os resultados e analizarémoslos dende un punto de vista teórico, o cal serviranos de introdución ao estudo da ecuación de KdV, a física de solitóns e os sistemas integrables.

Abstract

- The object of this work is the Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou experiment, carried out in 1953 with the aim of approaching the study of non-linear systems, modeled in this case by a chain of harmonic oscillators coupled through a non-linear interaction. It is probably the first numerical simulation in the history of physics, which produced an incredible succession of relevant contributions both theoretical and experimental in various fields.

We will carry out a set of numerical simulations of the evolution of the system as in the original experiment, we will visualize and interpret the results and we will analyze them from a theoretical point of view, which will serve as an introduction to the study of the KdV equation, the physics of solitons and integrable systems.

Agradecimientos

A mi tutor por mantener la motivación y ánimo en la realización de este trabajo, además de sus buenos consejos y guía al respecto, además de a mis compañeros de clase y a otros profesores de la facultad que con su buen desempeño docente ayudaron a llegar hasta este punto.

Índice

1. Introducción Histórica.[1]	3
2. Estudio teórico del problema.	5
2.1. Sistema lineal	5
2.2. Sistema FPUT.	6
3. Simulación de los sistemas.	8
3.1. Algoritmo de simulación.	8
3.2. Resultados de simulación.	10
4. Ecuación de Korteweg-de Vries e integrabilidad clásica.[7][8]	15
4.1. Ecuaciones de transporte.	15
4.2. Límite continuo: Ecuación de KdV	16
4.3. Ecuación de Korteweg-de Vries.	18
4.4. Concepto de solitón.	19
4.5. Cantidades conservadas.	20
4.6. Caso FPUT.	22
4.6.1. Tiempo de recurrencia.	23
5. Conclusiones.	24
Bibliografía	25

1. Introducción Histórica.[1]

Nos situamos en el principio de los años 50, en plena Guerra Fría, el célebre físico **Enrico Fermi** (1901-1954), Premio Nobel de Física en 1938 y participante en el proyecto Manhattan entre otros muchísimos trabajos, considera que las nuevas teorías físicas fundamentales requerirán de operadores y ecuaciones no lineales, evitadas hasta entonces debido a su difícil o no analítica solución.

Para desempeñar el estudio de dichas características no lineales, ve como potente aliado a las computadoras, por ejemplo el MANIAC I (Mathematical Analyzer, Numerical Integrator and Computer o Mathematical Analyzer, Numerator, Integrator and Computer, programada por Klara Dan von Neumann y nombrada por Nicholas Metropolis por la moda de estos nombres curiosos) de Los Álamos, usado normalmente para la investigación armamentística y con pocas personas, como Mary Tsingou, que sabían cómo usarlas. La principal función que se les asignaría sería la simulación numérica de problemas sin solución analítica explícita, sobre todo en límites asintóticos o a largo plazo.

Los encargados de dicho estudio serían:

John R. Pasta(1918-1984), físico computacional con una vida agitada que tras trabajar en el MANIAC I trabajaría en los ordenadores de la CEA y finalmente como profesor en la Universidad de Illinois.

Stanislaw M. Ulam(1909-1984), matemático conocido por el desarrollo de las armas termonucleares y el método Monte Carlo junto a Metropolis tras haber pasado por las Universidades de Princeton, Hardvard, Winsconsin-Madison, South California y haber participado en el proyecto Manhattan. Tras todo esto acabaría siendo profesor de la Universidad de Colorado.

Mary Tsingou(1928), física y matemática que empezó en el MANIAC I en la realización de cálculos y diseñando el algoritmo y el código de la simulación FPUT (figura 1). Además, fue una de las primeras personas en aprender Fortran y participó en más estudios. En los 70 trabajó en otra simulación FPUT más larga con J. L. Tuck, la resolución de la ecuación de Schrödinger, la mezcla de dos fluidos con densidades diferentes con John Von Neumann y en el proyecto Star Wars de armas en satélites. Finalmente se jubiló en 1991.

Deciden escoger el modelo más sencillo: la evolución de un cristal hacia el equilibrio térmico modelizado como una cadena de partículas con masa unidad unidas mediante una interacción cuadrática y un término no lineal débil, que impide la solución analítica.

Para la simulación debían transformar el sistema discreto de ecuaciones diferenciales ordinarias del movimiento de cada una de las partículas en un sistema de ecuaciones de diferencias.

Encargada del diseño del algoritmo y el código estaría Tsingou, aunque posteriormente solo fuese mencionada en 2 líneas de agradecimientos.

Se quería simular más sistemas, yendo a casos bidimensionales y luego mezclas y turbulencias, pero debido a la muerte de Fermi en 1954 solo se publicó en secreto el informe de mayo del 55.

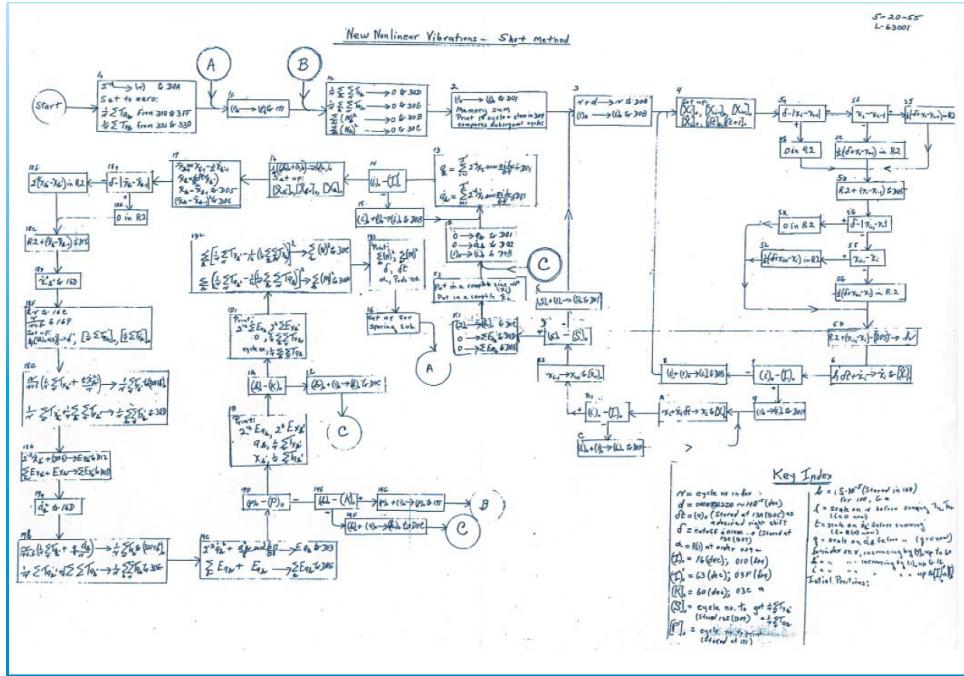


Figura 1: Algoritmo original de Mary Tsingou.[2]

En un modelo lineal, las vibraciones serán periódicas y, en el caso de empezarse con una curva sinusoidal, permanecerá en el modo normal inicial indefinidamente. Sin embargo, como afirmaba Fermi, en presencia de un término no lineal, la energía iría pasando de un modo a otro, yendo hacia la equipartición de la energía vista en la mecánica estadística y la cadena presentaría cada vez formas más irregulares.

Así parecía en las primeras simulaciones realizadas excitando un solo modo. Sin embargo, un día dejaron la computadora calculando más tiempo del usual, lo cual les permitió observar que, tras un cierto periodo de tiempo, el sistema volvía a tener casi toda su energía en ese primer modo y casi recuperaba su estado inicial, lo cual indicaba que la no linealidad no es suficiente para alcanzar la equipartición predicha.

En 1961, Menzel y Tuck utilizan las nuevas computadoras para repetir el experimento, observando que en el primer ciclo se pierde el 1% de la energía del primer modo, lo cual sigue sucediendo hasta 8 ciclos, donde vuelve a recuperarla hasta volver a estar toda en el 16º ciclo (superciclo).

En el mismo año, Zabusky trabaja en la solución analítica del problema y, junto a Kruskal, estudian el problema en el espacio real en vez de en el espacio de Fourier. Observan que la condición de periodicidad es resultado de que el sistema FPUT se aproxima bien a primer orden a la ecuación de Korteweg-de Vries (KdV) en el límite continuo, lo cual implica solitones (nombrados por ellos), ondas solitarias que no se deforman.

En 1968, Toda obtiene una fórmula analítica que estima el periodo de recurrencia T_R , con un valor muy similar al obtenido por la fórmula empírica de Zabusky.

2. Estudio teórico del problema.

2.1. Sistema lineal.

Empecemos repasando el modelo lineal que ya conocemos: una cadena de $N+2$ partículas con la misma masa m unidas cada una a su vecina más próxima mediante un muelle de constante k . El desplazamiento solo permitimos que sea en una dirección longitudinal, aunque representaremos el desplazamiento en la dimensión transversal para mejor visualización. Este desplazamiento respecto a la posición de equilibrio de la partícula i lo notaremos u_i . Tendremos los extremos fijos, por lo que $u_0 = u_{N+1}$. Cada partícula sentirá una fuerza de Hooke proveniente de sus dos vecinas, una a cada lado, por lo que la ecuación del movimiento será:

$$m \frac{d^2}{dt^2} u_i(t) = k(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}). \quad (1)$$

En términos del Hamiltoniano:[1]

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N \left(\frac{p_i^2}{m} + k(u_{i+1} - u_i)^2 \right). \quad (2)$$

El cual nos devuelve las ecuaciones esperadas: $\dot{u}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m}$, $\dot{p}_i = \frac{\partial H}{\partial u_i} = k(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})$. Definimos las matrices $m_{jl} = \frac{\partial^2 T}{\partial u_j \partial u_l}$ y $A_{jl} = \frac{\partial^2 V}{\partial u_j \partial u_l}$, que al sustituir en (2):

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j,l}^N \left(m_{jl}^{-1} p_j p_l + A_{jl} u_j u_l \right). \quad (3)$$

Como se observa, $\frac{1}{2} \sum_{j,l}^N A_{jl} u_j u_l$ es la energía potencial, por lo que haciendo su derivada respecto a u_i podremos obtener la ecuación del movimiento en forma de Newton para la partícula i , teniendo en cuenta que A_{jl} es simétrica: $m\ddot{u}_i = -\frac{\partial V}{\partial u_i} = -\frac{1}{2} \sum_l^N A_{il} u_l - \frac{1}{2} \sum_j^N A_{ji} u_j = -\sum_l^N A_{il} u_k$.

Diagonalizando esta matriz y siguiendo el desarrollo en modos y la teoría bien conocida de la cadena de osciladores acoplados de mecánica clásica como en [3], obtenemos, con $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$, que las frecuencias propias son:

$$\omega_n^2 = 4\omega_0^2 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{n\pi}{2(N+1)} \right). \quad (4)$$

Las posiciones u_j y los modos a_j vendrá dados de forma acoplada por:

$$u_j(t) = \sqrt{\frac{2}{(N+1)}} \sum_n a_n \operatorname{sen} \left(\frac{jn\pi}{N+1} \right), \quad (5)$$

$$a_j(t) = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_n u_n \operatorname{sen} \left(\frac{jn\pi}{N+1} \right). \quad (6)$$

Si ponemos el Hamiltoniano en función de las nuevas variables a_j y sus momentos $p'_j = m\dot{a}_j$, tenemos:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left(\frac{p'_j^2}{m} + m\omega_j^2 a_j^2 \right), \quad (7)$$

que es separable en energías, quedando:

$$E_j = \frac{1}{2} \left(\frac{p'_j^2}{m} + m\omega_j^2 a_j^2 \right). \quad (8)$$

2.2. Sistema FPUT.

Nuestra ecuación de partida será la misma que (1), pero con un término α no lineal pequeño:

$$m\ddot{u}_j = k(u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j) + k\alpha((u_{j+1} - u_j)^2 - (u_j - u_{j-1})^2). \quad (9)$$

También existe un modelo beta con una interacción no lineal al siguiente orden de la forma:

$$m\ddot{u}_j = k(u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j) + k\beta((u_{j+1} - u_j)^3 - (u_j - u_{j-1})^3), \quad (10)$$

el cual estudiaremos solo de forma superficial debido a sus muchas propiedades compartidas con el modelo alfa.

El Hamiltoniano del modelo alfa será:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N \left(\frac{p_i^2}{m} + k(u_{i+1} - u_i)^2 + \frac{\alpha}{3}k(u_{i+1} - u_i)^3 \right). \quad (11)$$

No podremos encontrar una solución analítica, pero sí lo podemos descomponer en modos normales como en el caso lineal, obteniendo:[4]

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left(\frac{p'_j^2}{m} + m\omega_j^2 a_j^2 \right) + \frac{\alpha}{3} \sum_{j,l,m=1}^N c_{jlm} a_j a_l a_m \omega_j \omega_l \omega_m. \quad (12)$$

El cómo calcular los coeficientes no lineales c_{jlm} aparece en [5], aunque los calcularemos.[1]

Lo primero que debemos hacer es poner u_j en forma exponencial, lo cual se consigue transformando el seno de (5) en la resta de dos exponentiales complejas y haciendo la extensión $a_k = -a_{-k}$. Así, obtenemos:

$$u_j = -i\sqrt{\frac{1}{2(N+1)}} \sum_{k=-(N+1)}^{N+1} a_k e^{\frac{ijk\pi}{N+1}}. \quad (13)$$

Ahora haremos la suma $S_n = \sum_j (u_{j+1} - u_j)^n$ para tener en consideración una ecuación general. Sustituimos (13) en la suma usando $F = \left(\sqrt{\frac{1}{2(N+1)}}\right)^n$ y sabiendo que k va de $-(N+1)$ a $(N+1)$:

$$\begin{aligned} S_n &= \sum_j (-i)^n F \left[\sum_k A \left(e^{\frac{i(j+1)k\pi}{N+1}} - e^{\frac{ijk\pi}{N+1}} \right) \right]^n, \\ S_n &= F \sum_j \left[a_k e^{\frac{i(j+1/2)k\pi}{N+1}} 2 \sin \left(\frac{k\pi}{2(N+1)} \right) \right]^n, \\ S_n &= F \sum_j \left[a_k e^{\frac{i(j+1/2)k\pi}{N+1}} \frac{\omega_k}{\omega_0} \right]^n. \end{aligned}$$

Aplicando la regla usual de multiplicación de polinomios $(x_1+x_2+\dots+x_m)^n = \sum_{k_1,k_2,\dots,k_n} \prod_l^n x_{k_l}$, yendo cada k_l de 1 a m :

$$S_n = \frac{F}{\omega_0^n} \sum_j \left[\sum_{k_1,k_2,\dots,k_n} \prod_l^n a_{k_l} \omega_{k_l} e^{\frac{i(j+1/2)\sum_l k_l \pi}{N+1}} \right],$$

$$S_n = \frac{F}{\omega_0^n} \sum_{k_1,k_2,\dots,k_n} \left[\prod_l^n a_{k_l} \omega_{k_l} \sum_j e^{\frac{i(j+1/2)\sum_l k_l \pi}{N+1}} \right].$$

Definiendo $(N+1)D(x) = \sum_j e^{\frac{ijx\pi}{N+1}} = \frac{1-e^{i\pi x}}{1-e^{\frac{i\pi x}{N+1}}}$, $Z(x) = e^{\frac{i\pi x}{2(N+1)}}$ con $x = \sum_l k_l$ y m un número entero, tenemos:

1. Si $x = 2m$, $D(x) = 0$, salvo si $x = 2m(N+1)$, para lo cual $D(x) = 1$ (L'Hôpital). Si $m = 2m'$, $Z(x)D(x) = 1$, si $m = 2m' + 1$, $Z(x)D(x) = -1$.
2. Si $x = 2m + 1$, la solución no es trivial, pero $Z(x)D(x) = \frac{-i}{(N+1) \operatorname{sen}\left(\frac{(2m+1)\pi}{2(N+1)}\right)}$, que es imaginario, por lo que no contribuye.

Por lo tanto, solo contribuyen los términos donde $\sum_l k_l = 2m(N+1)$. Como $n = 3$, se tendrá que cumplir $k + l + m = 2n(N+1)$.

Nuestros términos no lineales, teniendo en cuenta la repetición de índices jlm debido a la simetría de reflexión, son:

$$c_{jlm} = 2k \frac{(N+1)F}{\omega_0^3} Z(x)D(x) = \frac{k}{\omega_0^3 \sqrt{2(N+1)}} Z(x)D(x). \quad (14)$$

3. Simulación de los sistemas.

En caso de mayor interés, todos los programas usados pueden encontrarse en el repositorio de GitHub: <https://github.com/DOKOS-TAYOS/Experimento-FPUT.git>.

3.1. Algoritmo de simulación.

Simulamos numéricamente en Python y Fortran 95 por separado el sistema FPUT con la expresión (9) usando un método Runge-Kutta de cuarto orden con k , m y ω_0 normalizados para el sistema de ecuaciones:[9]

$$\dot{u}_j(t) = y_j(t), \quad (15)$$

$$\dot{y}_j(t) = (u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j) [1 + \alpha(u_{j+1} - u_{j-1})]. \quad (16)$$

En Fortran, de donde extraeremos los datos de posiciones, velocidades y energías por su velocidad de cálculo, no usamos ningún paquete salvo las funciones internas más básicas del lenguaje. En Python, donde haremos las representaciones y análisis, usamos los paquetes numpy, matplotlib, matplotlib.pyplot, time y pyo (este último para música).

En Fortran tendremos 4 modalidades de condiciones iniciales: modo individual, 2 modos iniciales consecutivos con media amplitud para cada uno, kink de Toda (no usado) y 2 solitones de KdV (no usado). Estos se pueden representar en Python con la misma lógica.

Primero, definimos todos los parámetros (π , N , alfa, amplitud inicial, modo inicial, modalidad, paso temporal, número de pasos y cada cuantos guardamos los datos) y todas las variables (las de conteo en bucles, tiempo, auxiliares, posiciones y sus derivadas, velocidades y sus derivadas y las 8 k del Runge-Kutta) y los nombres de archivo de guardado. Los parámetros son los números que no cambiarán durante la ejecución del programa y se inicializan como tales para optimizar la ejecución.

```
integer(kind=mi_entero), parameter :: npmax=32, ktot=1150000, ←
    kpaso=100, i1=6, i2=26
integer(kind=mi_entero), parameter :: modalidad=1, modo=1
integer(kind=mi_entero) :: i, j, kk, kcuenta
real(kind=mi_doble), parameter :: dt=1d-02, pi=3.1415926535898d00←
    , amp=1d00, alfa=0.25d00, anc=0.5d00
real(kind=mi_doble) :: t,npdb, dobmod, aux1, aux2, aux3, aux4
real(kind=mi_doble), dimension(0:npmax+1) :: u,y,up,yp,ak,akp,ek,←
    omega2
real(kind=mi_doble), dimension(0:npmax+1) :: k1u,k2u,k3u,k4u,k1y,←
    k2y,k3y,k4y
character(len=200) :: name
character(len=6) :: str
```

Hacemos un algoritmo que cree un archivo con un nombre tal que sea ‘Ruta de guardado’+‘\N’+número partículas+‘\datos_alpha’+alfa en formato entero o _decimales+_a+amplitud en formato entero o _decimales+modalidad. Para su lectura en Python se sigue el mismo algoritmo de construcción del nombre para la lectura.

Inicializamos todas las variables a 0 y calculamos todas las frecuencias ω_i^2 con la expresión (4).

Preparamos las condiciones iniciales con un bucle do de la forma:

```

if (modalidad==1) then
  do i=1,npmax
    u(i)=amp*sin(dobmod*pi*dble(i)/npdb)
  end do
else if (modalidad==2) then
  do i=1,npmax
    u(i)=0.5d00*amp*(sin(dobmod*pi*dble(i)/npdb)+sin( (dobmod+1.←
      d00)*pi*dble(i)/npdb ))
  end do

```

Siendo un seno de amplitud amp para el caso de modo simple (1) o la suma de dos senos de amplitud $\frac{amp}{2}$ para el caso de dos modos simultáneos (2). Las velocidades se dejan a 0. Calculamos las energías de cada modo con la expresión (8).

Ahora aplicamos el Runge-Kutta de 4º orden para el sistema de ecuaciones (15), siendo las variables derivadas las que terminan en p. La expresión del método de Runge-Kutta que se puede encontrar en [8] es:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x); \quad x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} + O(\Delta t^5). \quad (17)$$

El método lo implementamos con dos subrutinas *u_p(y, up)* y *y_p(u, yp)* que devuelven las derivadas *u* e *y* respectivamente según (15) con un bucle do.

```

call u_p(y,up); call y_p(u,yp)
k1u=dt*up; k1y=dt*yp
call u_p(y+k1y*0.5d00,up); call y_p(u+k1u*0.5d00,yp)
k2u=dt*up; k2y=dt*yp
call u_p(y+k2y*0.5d00,up); call y_p(u+k2u*0.5d00,yp)
k3u=dt*up; k3y=dt*yp
call u_p(y+k3y,up); call y_p(u+k3u,yp)
k4u=dt*up; k4y=dt*yp
u=u+k1u/6.d00 + k2u/3.d00 + k3u/3.d00 + k4u/6.d00
y=y+k1y/6.d00 + k2y/3.d00 + k3y/3.d00 + k4y/6.d00

```

Tras ello calculamos las energías de cada modo y, si el paso en el que estamos es múltiplo del número de pasos para guardar, guardamos en el archivo los datos en formato tiempo+enter+vector columna u+enter+vector columna de energías.

También tenemos versiones más especializadas en los solitones, la superrecurrencia y los espacios de fase (aquí guardamos *u* e *y*), pero siguen el mismo esquema básico. Además, tenemos sus análogos para el sistema beta.

Estos datos los ordenará un programa de Python para su lectura más sencilla y rápida en caso de leerse varias veces juntando los datos de tiempos, los de posiciones y los de energías en bloques y eliminando exceso de cifras para luego reescribir el archivo con los nuevos datos. Tras ello los lee un programa de Python que obtiene los datos, busca el tiempo de recurrencia buscando el segundo máximo de energías, comprueba la conservación de la energía (suma la energía de todos los modos), comprueba cuanta energía ha perdido el modo principal en la recurrencia y representa las energías de 4 modos frente al tiempo. También puede hacer una animación simultánea de la cuerda y las energías y hacer una representación sonora de la energía de cada modo.

Para la superrecurrencia la base es la misma, para la representación de solitones se resta en los datos $u_j - u_{j-1}$ para cada tiempo y se representa frente al tiempo y j en mapa de calor o en 3D.

3.2. Resultados de simulación.

Como partimos del experimento original [6], empezaremos simulando la evolución temporal de la energía para la cadena de $N = 32$ osciladores, con $\alpha = 0.25$, amplitud unidad y excitando solo el modo fundamental, sistema al cual llamaremos “Sistema modelo”, representado en la figura 2.

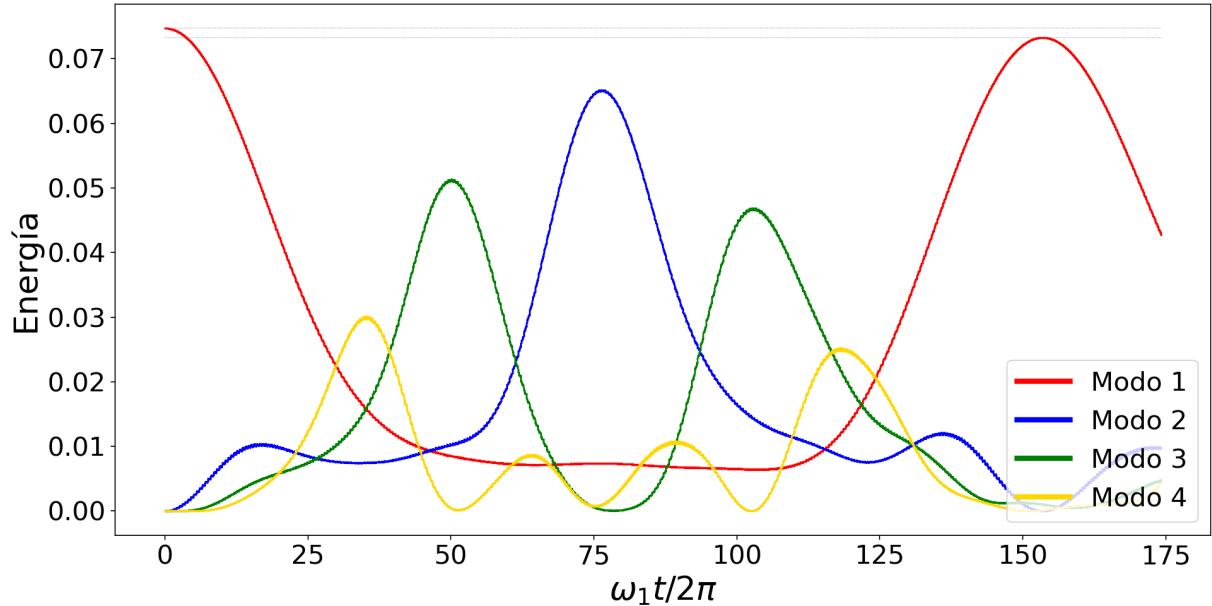


Figura 2: Evolución temporal de la energía de los 4 primeros modos para el sistema modelo.

Vemos que obtenemos aproximadamente los mismos resultados que en el trabajo original, con ligeras diferencias probablemente debidas a la mayor precisión de la que disponemos a la hora de simular numéricamente con los recursos actuales. El sistema, en vez de termalizar como predecía Fermi, presenta una recurrencia en el tiempo, recuperando el modo fundamental el 98 % de su energía tras 153 ciclos, lo cual sorprendió a los autores originales.

Ahora que tenemos estos resultados, estudiaremos la variación de la dinámica del sistema al modificar los parámetros implicados: constante de acoplamiento no lineal, amplitud inicial (energía), número de partículas, modo inicial y modos iniciales mezclados.

Empezaremos variando la constante de acoplamiento no lineal α en la figura 3. Lo primero a destacar es la reducción del tiempo de recurrencia con el aumento de α , que a su vez va acompañado de una mayor reducción de la energía del modo fundamental. Además, para valores de α superiores a 1 ya se observa una clara termalización. Para valores superiores a 3 nuestro esquema de integración ya no era válido para la resolución (aparición de divergencias en las fuerzas).

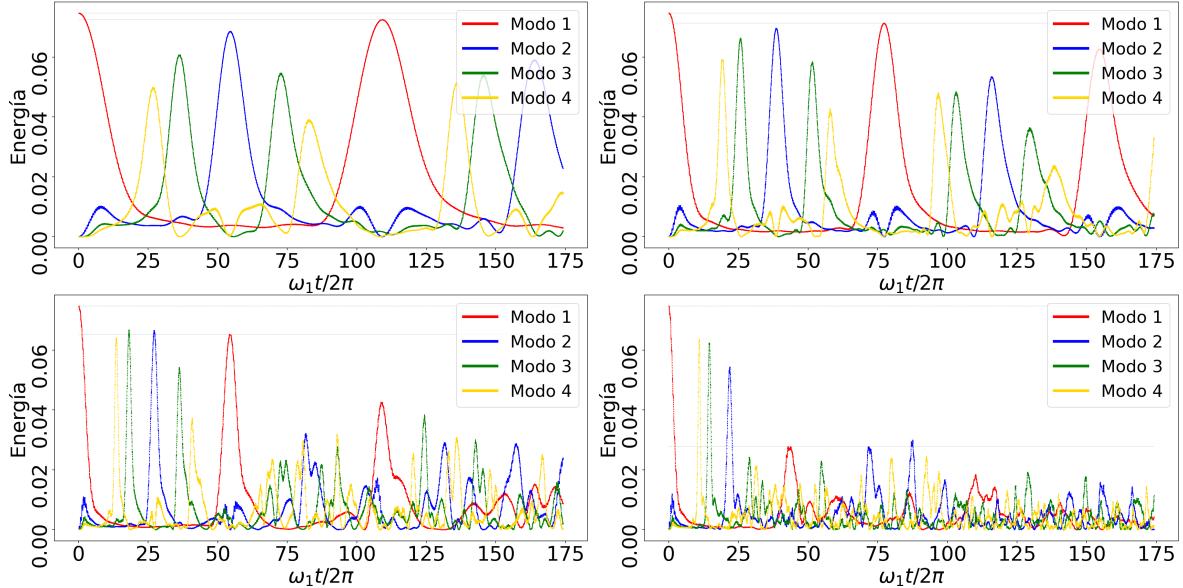


Figura 3: Evolución temporal de la energía de los 4 primeros modos para $\alpha = \{0.5, 1, 2, 3\}$.

Ahora comprobaremos cómo afecta el cambio de amplitudes al sistema en la figura 4. Podemos observar la misma tendencia que teníamos para α , haciendo que para amplitudes mayores se haga más patente la termalización.

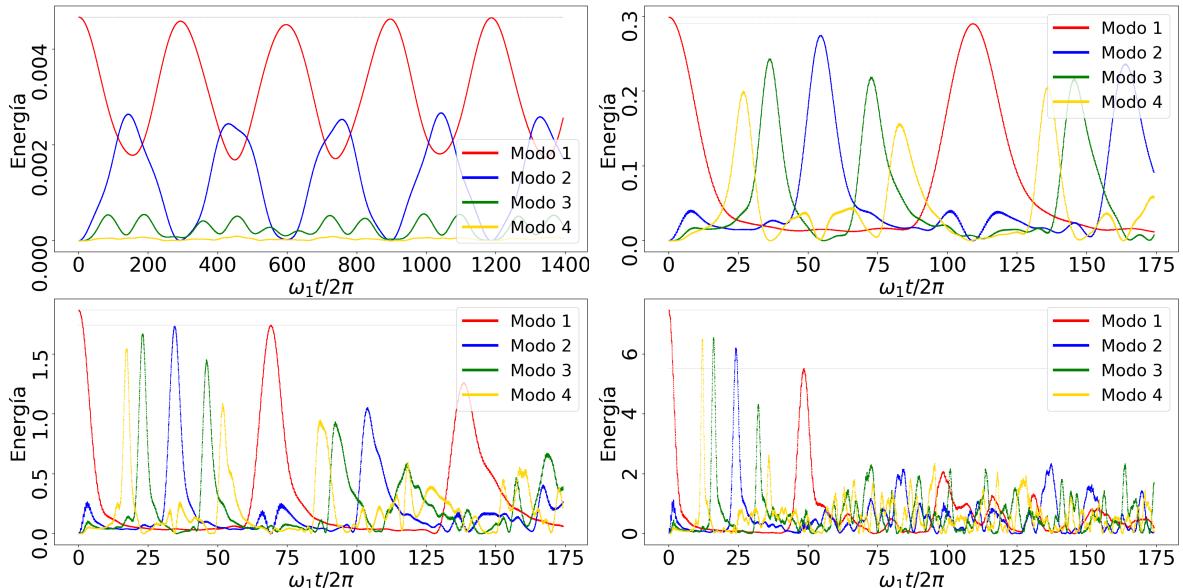


Figura 4: Evolución temporal de la energía de los 4 primeros modos para amplitud = $\{0.25, 2, 5, 10\}$.

Procedemos a ver cómo afecta el cambio de número de osciladores en la figura 5. Se observa que a más osciladores, mayor número de ciclos necesitamos para llegar a la recurrencia, justo lo contrario que con las otras dos magnitudes estudiadas. Sin embargo, hay que recordar la dependencia de la frecuencia ω_1 con el número de osciladores, lo cual hace que las conclusiones no puedan ser directas.

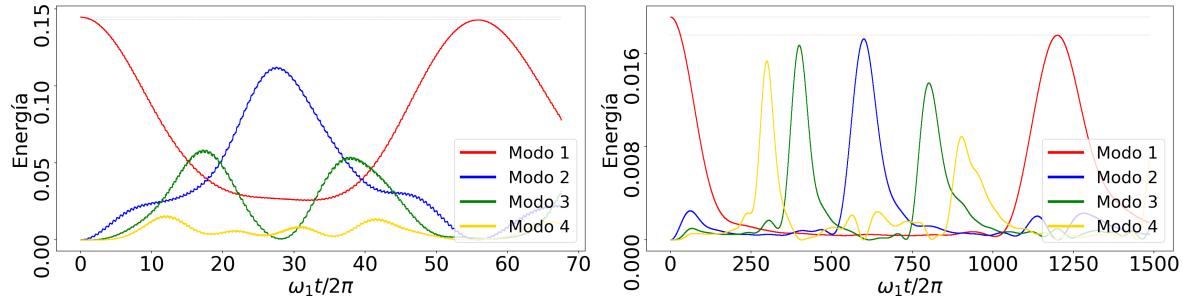


Figura 5: Evolución temporal de la energía de los 4 primeros modos para número de osciladores $= \{16, 128\}$.

Ahora empezaremos con diferentes modos iniciales en la figura 6. Lo más destacable a primera vista es el hecho de que, al tener como modo inicial uno que no es el fundamental, solo se excitan posteriormente los modos múltiplos del mismo. Además, vemos que a mayor modo inicial, menor profundidad relativa tiene el valle de pérdida de energía, además de que la recurrencia se vuelve extraordinariamente más rápida, hasta el punto que podemos observar la superrecurrencia en el modo 3.

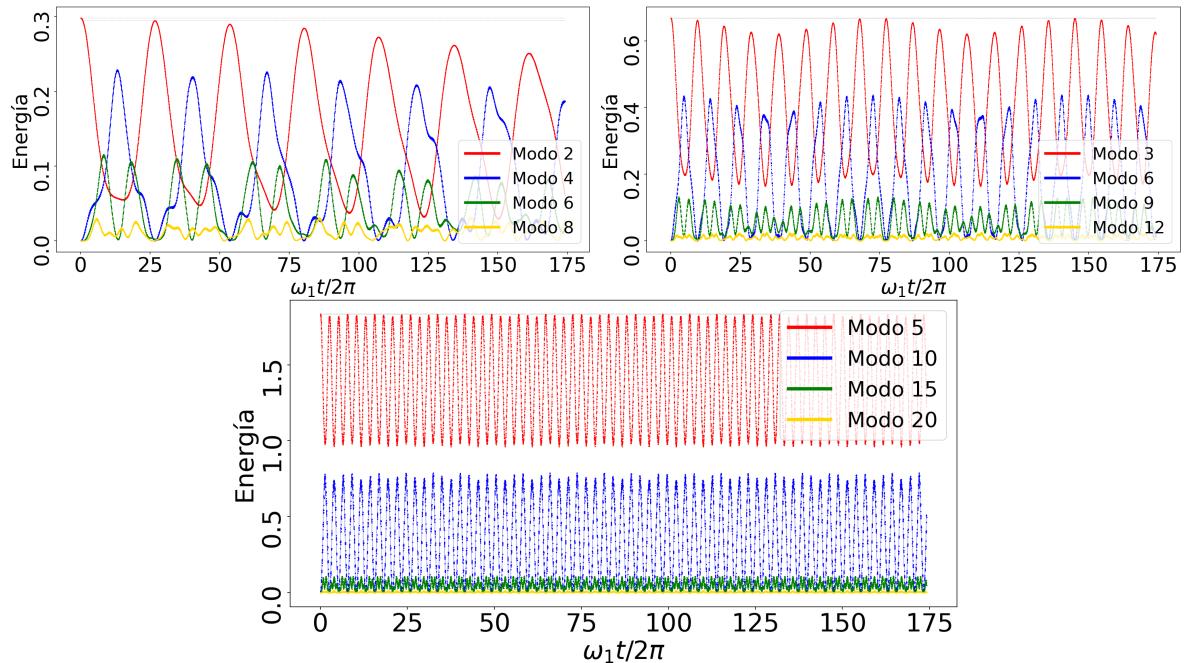


Figura 6: Evolución temporal de la energía de los modos múltiplos del modo inicial $= \{2, 3, 5\}$.

Vamos a ver qué sucede si combinamos 2 modos iniciales en la figura 7. Vemos que en este caso se vuelven a excitar los modos no múltiplos (como el fundamental), lo cual es debido a la pérdida de la simetría de nodos de los modos simples, que hacen que se pueda estudiar la cadena en modo n como n cadenas aisladas. Además, podemos intuir una recurrencia en los primeros modos combinados, pero a medida que el modo más bajo es de un número más alto, la situación se vuelve más caótica, pero sigue sin termalizarse.

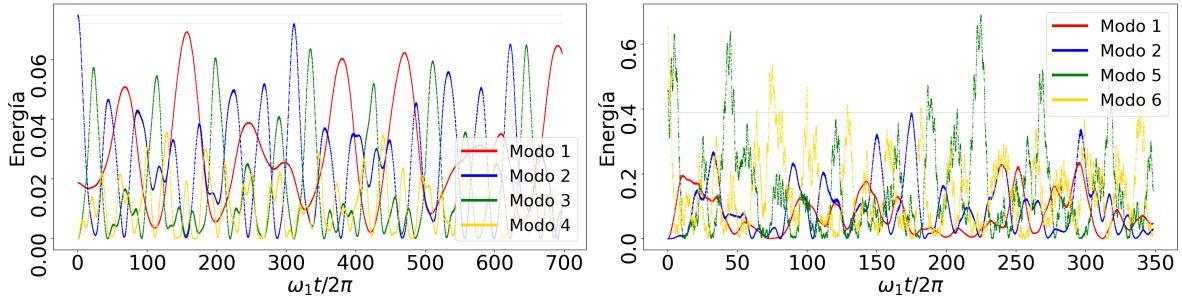


Figura 7: Evolución temporal de la energía para los modos iniciales = $\{(1, 2), (5, 6)\}$.

Finalmente, estudiamos la superrecurrencia en la figura 8. Observamos un fenómeno de superrecurrencia, el cual depende directamente del número de osciladores, a más osciladores, mayor tiempo de superrecurrencia, aunque también de los demás parámetros. Además, el número de osciladores aumenta la profundidad de la superrecurrencia y el intercambio de energía, hasta superar el segundo modo al primero en el caso de 32 partículas. En el caso de 64 partículas vemos una tendencia a la termalización, pero no podemos concluir si es debida a los métodos numéricos o a las características del sistema, ya que el enorme tiempo de trabajo obliga a la realización de una simulación muy larga.

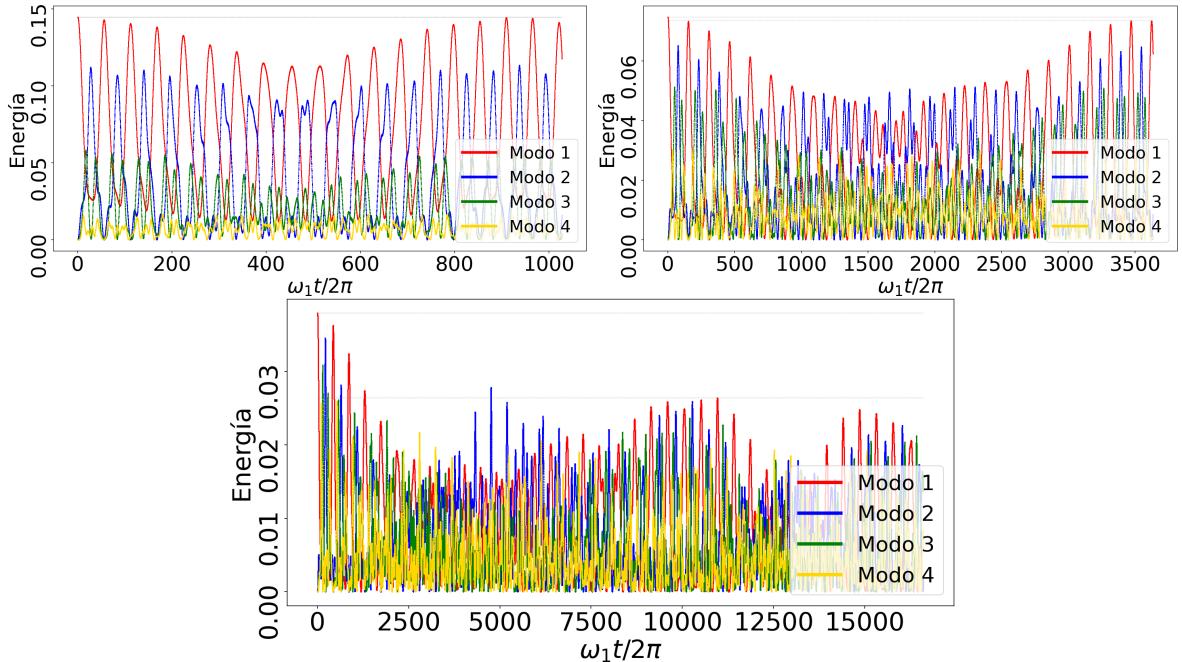


Figura 8: Superrecurrencia con número de osciladores = $\{16, 32, 64\}$.

Observemos sucintamente los resultados obtenidos para el modelo beta, en las figuras 9. Empezaremos con el modo fundamental cambiando β . Vemos que la recurrencia es extremadamente rápida y poco profunda a niveles bajos de β , a niveles demasiado altos vemos termalización y a niveles intermedios vemos una recurrencia.

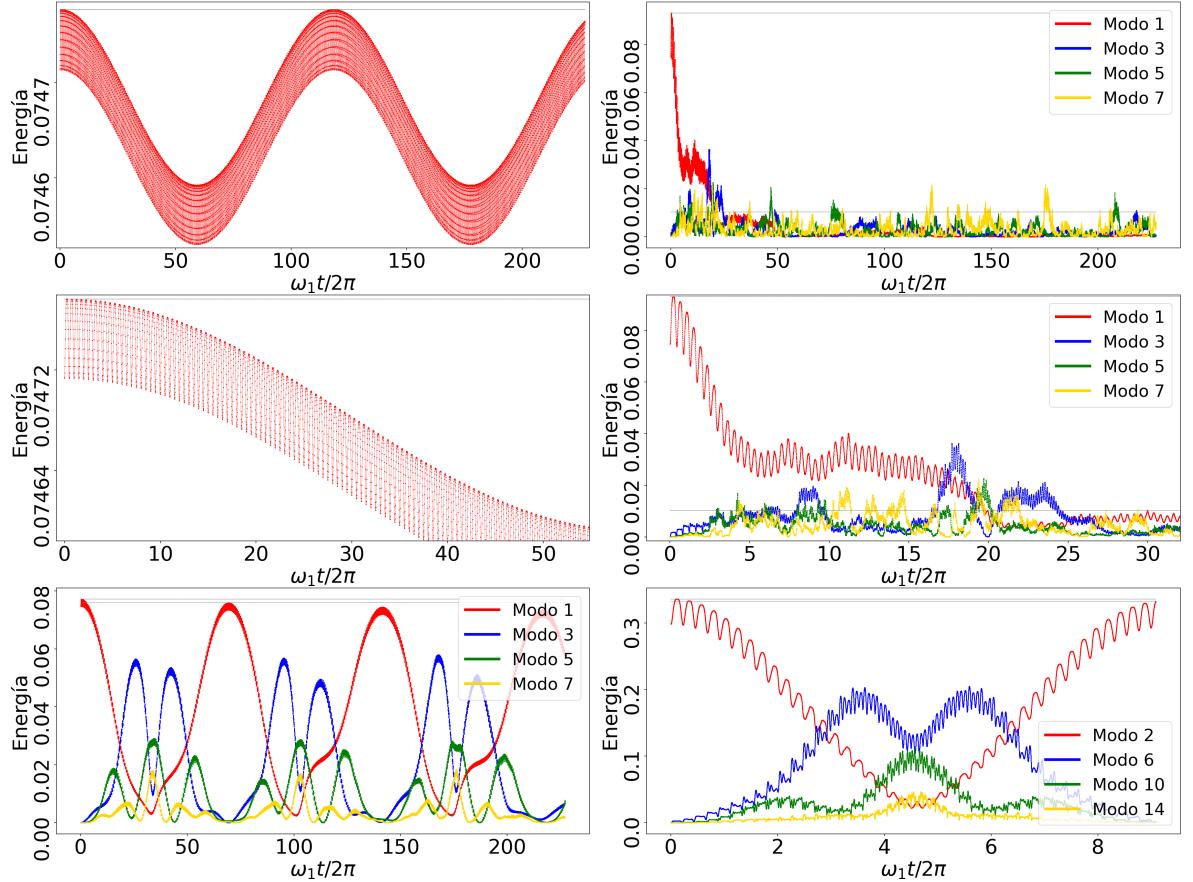


Figura 9: Evolución temporal de la energía para $\beta = \{0.25, 80\}$ totales y aumentados en modo inicial fundamental y $\beta = 10$ en modo inicial fundamental y $\beta = 10$ con modo inicial 2 respectivamente.

También comprobamos el efecto de la excitación de un modo distinto del fundamental en la última gráfica. Algo importante a destacar es que solo se excitan los modos múltiplo impar del inicial.

4. Ecuación de Korteweg-de Vries e integrabilidad clásica.[7][8]

En este capítulo veremos que nuestro sistema se aproxima en ciertos límites a la ecuación de Korteweg-de Vries (KdV) y probaremos numéricamente ciertas características de la misma, dando explicación a los fenómenos expuestos en la anterior sección. La pregunta que nos queda es: ¿es tan importante esta ecuación como para hacerle caso? La respuesta nos puede llevar mucho más lejos de lo que nos podríamos llegar a esperar, empezando por el comportamiento de las olas gigantes hasta llegar a las formas más fundamentales de la física de partículas, fibras ópticas (solución numérica de la ecuación de Schrödinger no lineal), uniones de Josephson (modelo de Sine-Gordon), condensados de Bose-Einstein (modelo de Skyrmiones) y superconductividad (modelo de Abrikosov-Nielsen-Olesen). Además de ello, es el principio de un largo campo sobre integrabilidad clásica, que no abordaremos con profundidad debido a que excedería los objetivos de este trabajo. Sin embargo, empecemos introduciéndola en contexto.

4.1. Ecuaciones de transporte.

Un buen día de, John Scott Russell (1808-1882), ingeniero, arquitecto naval y constructor de barcos, observó el movimiento de un bote que se detuvo repentinamente en un canal, generando una elevación de agua que no se detuvo, desplazándose a gran velocidad. Al verlo, decidió seguir dicha elevación solitaria, que tenía forma redondeada, suave y bien definida, la cual permaneció sin cambio ni disminución de velocidad durante una gran distancia, lo cual en principio parecería imposible. Su observación fue que la velocidad de la elevación seguía $c = g(h + A)$, con h la profundidad de agua y A la altura de la elevación.

Posteriormente, George Airy, el astrónomo y matemático responsable de la 'mancha de Airy', postuló que podría no tratarse de un fenómeno de ondas lineales, lo cual siguió G.G.Stokes. Tras ello, Boussinesq y Rayleigh descubrieron la teoría no lineal aproximada correcta para dicho fenómeno.

Como bien sabemos, una ecuación de ondas lineal simple es:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (18)$$

donde podemos probar la solución de D'Alembert $u(x, t) = f(x - ct)$ y una solución armónica $u(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$, dando finalmente la ecuación de transporte:

$$u_t + cu_x = 0. \quad (19)$$

Si queremos introducir una dispersión ($k - k^3 - \omega = 0$, por ejemplo), necesitamos términos en derivadas impares más altas como $u_t + cu_x + u_{xxx} = 0$. Si queremos disipación, deberemos poner derivadas pares como $u_t + cu_x - u_{xx} = 0$.

Como queremos que la velocidad de la onda dependa de la amplitud de la misma, cambiamos el término $c = 1+u$, teniendo $u_t + (1+u)u_x = 0$, cuya solución general será $u(x, t) = f(x - (1+u)t)$. El problema de esta solución es que nos da ondas de choque y una u multivaluada de x .

Buscando fenómenos de dispersión o disipación obtenemos, por ejemplo:

1. Korteweg-de Vries (1895) (dispersión): $u_t + (1+u)u_x + u_{xxx} = 0$.
2. Burger (1906) (disipación): $u_t + (1+u)u_x - u_{xx} = 0$.

4.2. Límite continuo: Ecuación de KdV.

Vamos a realizar el límite continuo del sistema de FPUT y veremos que en ciertos límites converge a la ecuación de Korteweg-de Vries. Todo el método se basa en la realización de una serie de Taylor en los términos del lado derecho de la ecuación (9).

Ponemos dicha ecuación en una forma más sencilla para trabajar:[9]

$$\ddot{u}_j = \frac{c^2}{\Delta x^2} (u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j) [1 + \alpha(u_{j+1} - u_{j-1})], \quad (20)$$

$$\begin{aligned} u_{j+1} &= u(x + \Delta x, t) = u_j + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dots \\ u_{j-1} &= u(x - \Delta x, t) = u_j - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \dots \\ u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j &= \Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\Delta^4 x}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \dots \\ u_{j+1} - u_{j-1} &= 2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^3}{3} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots \end{aligned}$$

Sustituyendo en la ecuación (20) tendremos:

$$\ddot{u}_j = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \dots \right) \left[1 + \alpha \left(2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^3}{3} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots \right) \right]. \quad (21)$$

Yendo a segundo orden en Δx tenemos:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 2\alpha \Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + O(\Delta^4, \alpha \Delta x^3). \quad (22)$$

Uno podría pensar en quedarse solamente con el término en $\alpha \Delta x$, pero ello lleva a fenómenos no observados, como ondas de choque. Así nos quedamos con:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 2\alpha \Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}. \quad (23)$$

Ahora recordaremos que estamos tratando con una solución que se desplaza como una onda, así que parece lógico hacer el siguiente cambio de variable:

$$\begin{aligned} r &= x - ct, \\ s &= \alpha \Delta x ct, \\ y(r, s) &= u(x, t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial y}{\partial t} &= \frac{\partial r}{\partial t} \frac{\partial y}{\partial r} + \frac{\partial s}{\partial t} \frac{\partial y}{\partial s} = -cy_r + \alpha \Delta x c y_s, \\ \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} &= c^2 y_{rr} - 2\alpha \Delta x c^2 y_{rs} + (\alpha \Delta x c)^2 y_{ss}, \\ \frac{\partial y}{\partial x} &= y_r. \end{aligned}$$

Sustituyendo en (23):

$$y_{rr} - 2\alpha\Delta x y_{rs} + (\alpha\Delta x)^2 y_{ss} - y_{rr} = 2\alpha\Delta x y_r y_{rr} + \frac{\Delta x^2}{12} y_{rrrr}, \quad (24)$$

$$y_{rs} - \frac{\alpha\Delta x}{2} y_{ss} = -y_r y_{rr} - \frac{\Delta x}{24\alpha} y_{rrrr}. \quad (25)$$

Estamos en un límite de α y Δx tendiendo a cero, por tanto, el término de $\alpha\Delta x$ tiende a cero, mientras que el término de $\frac{\Delta x}{\alpha}$ tiende a un valor límite que llamaremos $\chi = \lim_{\Delta x \rightarrow 0, \alpha \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{24\alpha}$. Con esto, haciendo el cambio $z = -\frac{y_r}{6}$ tenemos:

$$z_s - 6zz_r + \chi z_{rrr} = 0, \quad (26)$$

que, como vemos, es la ecuación de Korteweg-de Vries.

Es importante destacar que esta aproximación solo será válida para Δx y α pequeños y con Δx un orden por encima de α . Por otro lado, $\Delta x = \frac{L}{N+1}$, por lo que es una medida de la cantidad de osciladores por unidad de longitud. Esto en nuestras simulaciones significa que, ya que ponemos $w_0 = 1$ y $k = 1$, si dejamos como unidades las de la energía, tenemos que $\chi = \frac{L\pi^2 E_0}{6(N+1)\alpha}$, siendo todo números adimensionales en la ecuación dejando χ en metros. Esto implica que la energía y α deben estar relacionados de forma directa en el parámetro χ .

Análogamente para el sistema beta regido por la ecuación del movimiento (10) podemos obtener también dicha aproximación si renunciamos a la condición del límite de $\beta \rightarrow 0$ y haciendo los cambios de variable:

$$r = x - ct; \quad s = \beta\Delta x^2 ct; \quad z = -\frac{y_r}{\sqrt{3}}, \quad (27)$$

obteniendo como límite la ecuación:

$$z_s - 9z^2 z_r + \frac{1}{24\beta} z_{rrr} = 0. \quad (28)$$

Si comparamos (26) y (28) vemos una gran similitud. Esto es debido a que ambas son ecuaciones de KdV, siendo (28) una de las infinitas ecuaciones de KdV modificadas. Para verlo de forma más clara, las vamos a expresar de la forma:

$$\alpha : z_s - 3(z^2)_r + \frac{\Delta x}{24\alpha} z_{rrr} = 0; \quad \beta : z_s - 3(z^3)_r + \frac{1}{24\beta} z_{rrr} = 0, \quad (29)$$

siendo la forma más general de la ecuación de KdV generalizada debida a Masayoshi Tsutsumi, Toshio Mukasa y Riichi Iino en 1970[14]:

$$z_s - (f(z))_r + \delta z_{rrr} = 0, \quad (30)$$

que tiene como casos particulares las ecuaciones de KdV alfa y beta.

4.3. Ecuación de Korteweg-de Vries.

Vista la aproximación en el límite continuo, vamos a analizar el caso de KdV, empezando por la reparametrización:

$$1 + u \rightarrow \alpha u, \quad t \rightarrow \beta t, \quad x \rightarrow \gamma x. \quad (31)$$

Obteniendo así una ecuación de KdV $u_t + \frac{\alpha\beta}{\gamma}uu_x + \frac{\beta}{\gamma^3}u_{xxx} = 0$, que en el caso $\beta = \gamma = 1$, $\alpha = 6$ nos da la forma más conocida de la ecuación de KdV:

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0. \quad (32)$$

Vamos a resolver esta ecuación, buscando soluciones de la forma $u(x, t) = u(x - vt) = u(\theta)$, donde $\theta = x - vt$. Haciendo este cambio de variable, calculamos las derivadas para poner la ecuación diferencial en esta coordenada móvil.

$$u_t = \frac{du}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} = u'(-v); \quad u_x = \frac{du}{d\theta} \frac{d\theta}{dx} = u'; \quad u_{xxx} = u''', \quad (33)$$

$$-vu' + 6uu' + u''' = (-vu + 3u^2 + u'')' = 0. \quad (34)$$

Integraremos en θ y multiplicamos la ecuación por u' e integramos en u' :

$$u'' + 3u^2 - vu + C_1 = 0 \rightarrow \frac{u'^2}{2} + u^3 - \frac{vu^2}{2} + C_1u = C_2. \quad (35)$$

Ahora bien, queremos que la solución sea localizada, por lo que hacemos que para $\theta \rightarrow \pm\infty$ la se anulen ella y sus derivadas, por lo que $C_1 = C_2 = 0$:

$$\frac{u'^2}{2} + u^3 - \frac{vu^2}{2} = 0 \rightarrow d\theta = \frac{du}{\sqrt{vu^2 - 2u^3}}. \quad (36)$$

Si hacemos la integral obtenemos:

$$\theta - \theta_0 = \frac{1}{\sqrt{v}} \left(\ln \left| \frac{\sqrt{1 - \frac{2u}{v}} - 1}{\sqrt{1 - \frac{2u}{v}} + 1} \right| - \ln \left| \frac{\sqrt{1 - \frac{2u_0}{v}} - 1}{\sqrt{1 - \frac{2u_0}{v}} + 1} \right| \right). \quad (37)$$

Podemos separar el término de u y θ del de u_0 y θ_0 y exponenciar todo. Debemos recordar que tenemos un valor absoluto en el argumento del logaritmo neperiano, por lo que escogeremos la solución de argumento con signo opuesto:

$$e^{\sqrt{v}\theta} = -\frac{\sqrt{1 - \frac{2u}{v}} - 1}{\sqrt{1 - \frac{2u}{v}} + 1}. \quad (38)$$

Elevamos ambos miembros al cuadrado y despejamos u :

$$\sqrt{1 - \frac{2u}{v}} (e^{\sqrt{v}\theta} + 1) = -(e^{\sqrt{v}\theta} - 1), \quad (39)$$

$$u = \frac{v}{2} \left(1 - \left(\frac{e^{\sqrt{v}\theta} - 1}{e^{\sqrt{v}\theta} + 1} \right)^2 \right) = \frac{v}{2} (1 - \tanh^2(\sqrt{v}\theta/2)) = \frac{v}{2} \operatorname{sech}^2(\sqrt{v}\theta/2), \quad (40)$$

que es la solución para una perturbación libre en el sistema llamada **solitón** (figura 10).

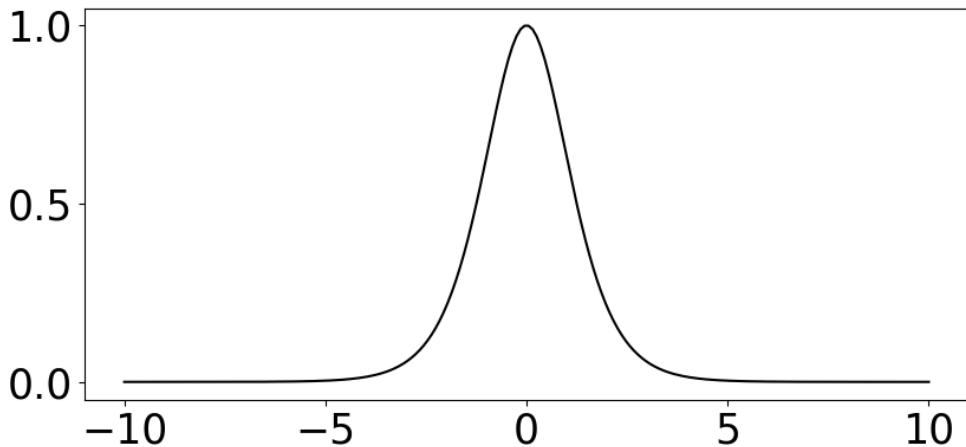


Figura 10: Representación gráfica de la solución solitónica de KdV.

Podemos ver que la velocidad de la solución es directamente proporcional a su amplitud ($v = 2A$), mientras que su ‘vector de ondas’ es proporcional a la raíz cuadrada de la velocidad, por lo que deducimos que las soluciones más altas se propagan más rápido y son más finas. En caso de querer un antisolitón, solo deberemos cambiar u por $-u$, lo cual deja $u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0$. Hemos de darnos cuenta de que esta ecuación no es invariante Lorentz, pero aún así puede ser interesante para el estudio de las ecuaciones no lineales. También es importante destacar que es un caso particular en cierta aproximación (fondo poco profundo, ondas largas unidimensionales y líquido no viscoso irrotacional e incompresible) de la archiconocida ecuación de Navier-Stokes.

También existe otra solución, la solución de onda cnoidal, pero no es la que nos interesa en este trabajo.

Para la obtención de soluciones con más solitones existen técnicas de resolución, muy complejas, como el Scattering inverso o las transformaciones de Bäcklund, para lo cual pueden consultar este curso de Sistemas Integrables de J. M. Conde Martín de la URJC o [7]. La solución para dos solitones es:

$$u(x) = -12 \frac{3 + 4 \cosh(2x - 8t) + \cosh(4x - 64t)}{(3 \cosh(x - 28t) + \cosh(3x - 36t))^2}. \quad (41)$$

4.4. Concepto de solitón.

Un solitón es una solución de una ecuación no lineal en derivadas parciales que representa una onda solitaria viajera, la cual preserva su forma, está localizada en una región, no obedece el principio de superposición y no se dispersa. Esto es algo que se nos asemeja mucho a la idea usual de partícula. En palabras de Zabusky y Kruskal en el paper original[10] donde le dan nombre “los solitones ‘pasan a través’ unos de otros sin perder su identidad. Aquí tenemos un proceso físico no lineal en el cual interaccionan pulsos localizados que no se dispersan irreversiblemente.”

En el caso de KdV, vemos que el solitón existe debido al equilibrio entre el término no lineal y el término dispersivo. El término no lineal hace que la parte más alta de la ola se quiera adelantar al resto de la misma, rompiéndola, pero el término dispersivo quiere que la parte baja de la misma vaya más rápido, compensándose un efecto con el otro.

Además, estos solitones tienen la propiedad de poder atravesarse interaccionando y, a distancias suficientemente grandes, ser independientes. Justo como lo esperaríamos de las partículas.

Para ver estas propiedades podemos ver la figura 11, donde vemos que la velocidad depende de la altura del solitón y la interacción local de los mismos introduciendo una fase.

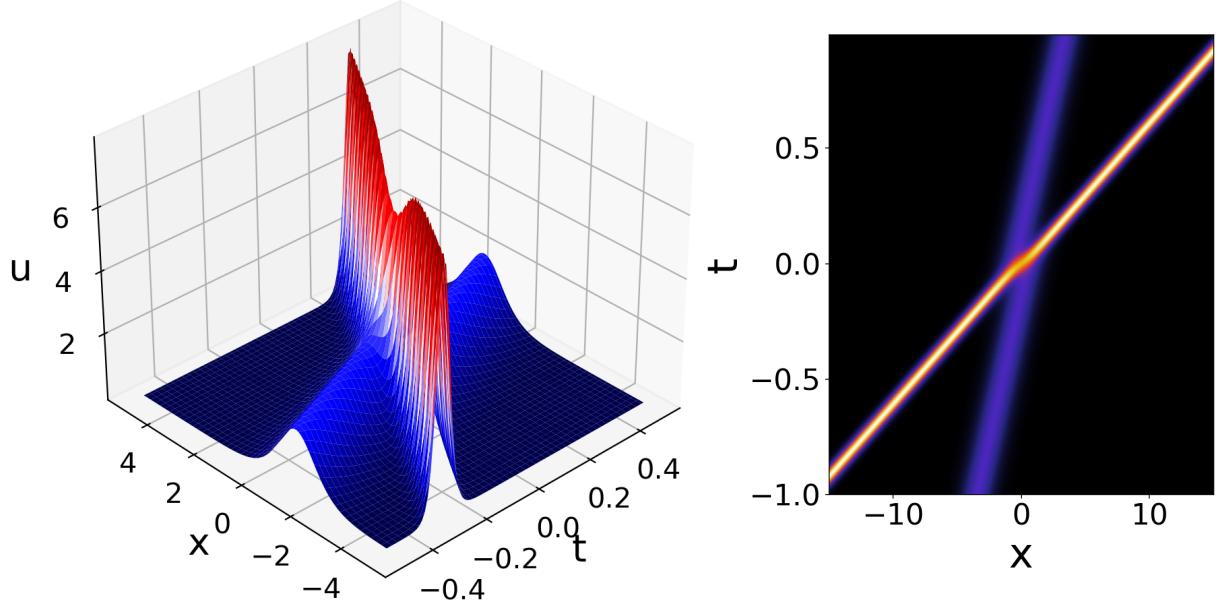


Figura 11: Representación gráfica en 3D y en mapa de calor de las soluciones analíticas de KdV para 2 solitones.

4.5. Cantidades conservadas.

Debido a la integrabilidad de la ecuación de KdV, podremos encontrar infinitas cantidades conservadas. Recordemos la forma de la ley de conservación:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial X}{\partial x} = 0, \quad (42)$$

siendo T la densidad conservada y X el flujo. Para obtener dichas cantidades integramos en x :

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} T dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial X}{\partial x} dx = X|_{-\infty}^{\infty} = 0 \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} T dx = cte. \quad (43)$$

Para ejemplificar calcularemos las 3 primeras.

La más obvia es la de la masa. Si ponemos el segundo y tercer términos de la ecuación de KdV en forma de la derivada de algo (los integramos), obtenemos:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(u_{xx} - 3u^2)}{\partial x} = 0, \quad (44)$$

donde vemos claramente que $T_1 = u$, lo cual integrado nos daría una cantidad que sería el area bajo la curva u , que se correspondería a la masa total.

Para la segunda cantidad, multiplicaremos KdV por u , quedando tras integrar:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{u^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(uu_{xx} - 2u^3 - \frac{u_x^2}{2} \right) = 0, \quad (45)$$

por lo que $T_2 = \frac{u^2}{2}$ cuya integral se correspondería con el momento.

La tercera no es trivial, pero se consigue mediante $3u^2 \times KdV + u_x \times \frac{\partial}{\partial x} KdV$, obteniendo $T_3 = u^3 + \frac{u_x^2}{2}$, cuya integral correspondería con la energía.

Las siguientes son para nada triviales, para lo cual ponemos por ejemplo la densidad conservada de orden 10[11] :

$$\begin{aligned} T_{10} = & \frac{1}{10}u_0^{10} - 36u_0^7u_1^2 - 630u_0^4u_1^4 + \frac{765}{5}u_0^6u_2^2 - 1512u_0u_1^6 + 2160u_0^4u_2^3 + 9072u_0^3u_1^2u_2^2 - \\ & - \frac{1944}{5}u_0^5u_3^2 + 13608u_0^2u_4^2 + \frac{238464}{5}u_0u_1^2u_3^2 + 13608u_1^4u_2^2 - 12960u_0^3u_2u_3^2 - 11664u_0^2u_1^2u_3^2 + \\ & + 648u_0^4u_4^2 + \frac{178848}{11}u_2^5 - \frac{1524096}{55}u_0u_1u_3^3 - \frac{4906656}{55}u_0u_2^2u_3^2 - \frac{334368}{5}u_1^2u_2u_3^2 + \\ & + \frac{163296}{11}u_0^2u_2u_4^2 + 7776u_0u_1^2u_4^2 - \frac{7776}{11}u_0^3u_5^2 - \frac{11045808}{715}u_3^4 + \frac{5878656}{715}u_0u_4^3 + \\ & + \frac{22208256}{715}u_1u_3u_4^2 + \frac{26570592}{715}u_2^2u_4^2 - \frac{1306368}{143}u_0u_2u_5^2 - \frac{23328}{11}u_1^2u_5^2 + \\ & + \frac{69984}{143}u_0^2u_6^2 - \frac{5878656}{715}u_4u_5^2 + \frac{1679616}{715}u_2u_6^2 - \frac{139968}{715}u_0u_7^2 + \frac{419904}{12155}u_8^2. \end{aligned}$$

Antes encontrar cada nueva cantidad conservada podía llevar una cantidad indecible de tiempo y esfuerzo, hasta que se encontró un método general para encontrarlas, basada en la transformación de Gardner $u = \omega + \epsilon\omega_x + A\epsilon^2\omega^2$.

Si sustituimos dicha transformación en la ecuación de KdV, obtenemos (con $A = -1/6$):

$$u_t + uu_x + u_{xxx} = \left(1 + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\epsilon^2}{3}\omega \right) \left(\omega_t + \omega\omega_x + \omega_{xxx} - \frac{\epsilon}{6}\omega^2\omega_x \right) = 0, \quad (46)$$

donde vemos que el último factor debe ser nulo para cumplirse KdV, siendo en su forma de ley de conservación:

$$\frac{\partial\omega}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\omega^2}{2} + \omega_x x - \frac{\epsilon^2}{18}\omega^3 \right) = 0. \quad (47)$$

Si expandimos $\omega = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n \omega_n$ y comparamos con el resultado de la ecuación de KdV podemos obtener los valores de ω_n . Además, por (47), al sustituir tendremos que $T = \omega = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n T_n$, de donde podemos sacar todas las cantidades conservadas, las cuales son infinitas todas ellas en involución bajo los corchetes de Poisson continuos con la Hamiltoniana de la forma:

$$\{H, G\} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta H}{\delta u} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right), \quad (48)$$

siendo $H = \int_{-\infty}^{\infty} T_3 dx = \int_{-\infty}^{\infty} (u^3 - \frac{1}{2}u_x^2) dx$, aunque podríamos escoger como Hamiltoniana la integral en x de cualquiera de las densidades conservadas T_n .

4.6. Caso FPUT.

Hemos visto que nuestro sistema FPUT se aproxima bajo cierto límite a la ecuación de KdV, por lo que vamos a analizar sus principales propiedades.

La primera de ellas es la aparición de ondas solitarias en el sistema, pero no en la variable u , sino que en la variable $u_x = u_i - u_{i-1}$. Podemos observar en la figura 12 la estructura de solitones que aparece en nuestra simulación comparada con la que se obtiene de KdV. Vemos que al principio todos los solitones viven en regiones alternadas muy juntas y organizados (a), pero dichas zonas se empiezan a entremezclar hasta que dichas zonas están conformadas por solitones libres (b y c) que interactúan en regiones pequeñas, ganando una fase relativa y prosiguiendo su viaje independientes. Además, rebotan en las paredes por las condiciones de contorno. Vemos que a mayor parámetro α , más pronunciados son los solitones, aumentando el número de ellos con el número de osciladores.

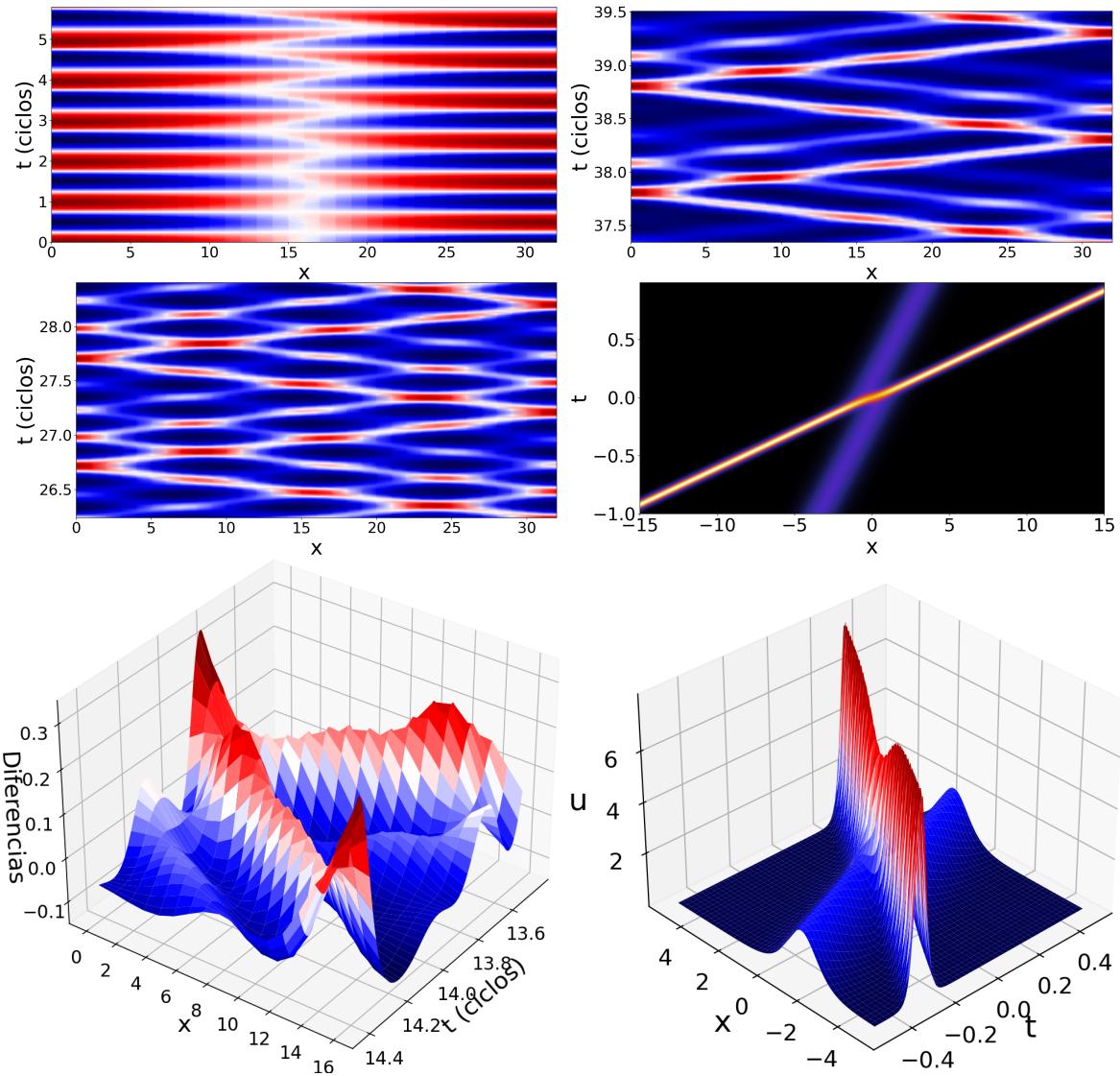


Figura 12: Solitones resultantes del campo de diferencias $u_x = u_i - u_{i-1}$ en nuestra simulación y los solitones exactos de KdV.

Lo que sucede realmente es algo análogo al fenómeno de dispersión de ondas senoidales en una onda lineal de forma arbitraria. En este caso, las autofunciones del problema no son ondas senoidales como el coseno que hemos puesto en la condición inicial, sino que son solitones. Como los solitones conforman una base funcional como lo hacen las ondas senoidales, podemos hacer una “Transformada de Fourier” de solitones, siendo el coseno una suma no lineal de los mismos. Al ser los solitones más altos más rápidos, se van separando lentamente de los que son algo más bajos que ellos, haciendo que el grupo cohesionado se separe hasta formarse una sopa de solitones no correlacionados y caóticos, lo cual parecería un estado ergódico.

Sin embargo, tras cierto tiempo, los solitones, que no han perdido su integridad individual pueden volver a reunirse en el mismo lugar en las mismas condiciones que las iniciales, haciendo que toda la energía vuelva al modo inicial. Sin embargo, la configuración en la que vuelven a estar juntos puede no ser exactamente la inicial, con pequeñas desviaciones que explican que no toda la energía vuelva al modo inicial, quedando una parte en la energía de interacción entre modos. Esto explica también el fenómeno de superrecurrencia, debido a que aunque en la primera recurrencia la configuración no sea la inicial por un desfase entre los solitones, este desfase se puede ir acumulando de forma que tras varias recurrencias sí coincidan en exactamente la misma configuración.

4.6.1. Tiempo de recurrencia.

Vamos a ver cómo el tiempo de recurrencia T_R se comporta frente a las diferentes constantes del problema, lo cual nos servirá como un test de que nuestras simulaciones son coherentes con estudios anteriores.

La predicción dada en [13] nos ofrece una expresión de la forma:

$$T_R = 0.88 \frac{N^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\alpha a}}, \quad (49)$$

por lo que intentaremos observar dichos patrones.

Para testear esta predicción, usaremos la escala logarítmica, de forma que:

$$\ln(T_R) = \ln(0.88) + \frac{5}{2} \ln(N) - \frac{1}{2} \ln(\alpha) - \frac{1}{2} \ln(a), \quad (50)$$

por lo que para cada constante x que variaremos, haremos el ajuste a la recta $\ln(T_R) = a \ln(x) + b$. La incertidumbre tomada para x siempre será cero, mientras que para el tiempo de recurrencia tiene una incertidumbre asociada de un 0.25 % de T_R . En la figura 13 podemos observar el ajuste de dichos valores a sus correspondientes rectas, mientras que en 1 podremos ver los parámetros de ajuste y su test de χ^2 correspondiente.

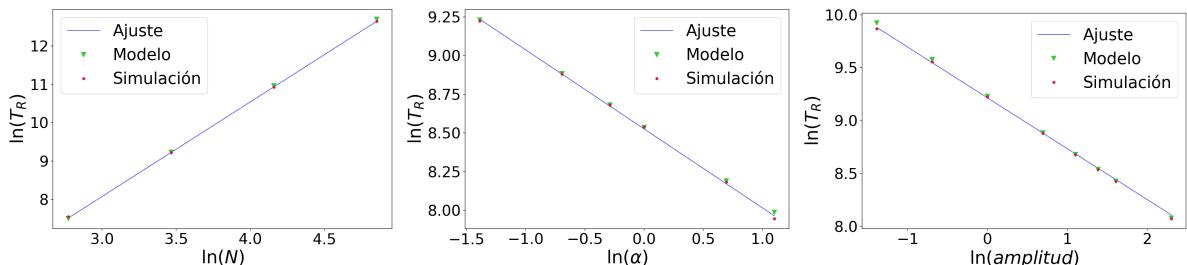


Figura 13: Valores de simulación y de modelo comparados, con un ajuste lineal realizado a los datos de simulación.

Variable	m_{modelo}	m	$\sigma(m)$	n_{modelo}	n	$\sigma(n)$	χ^2
N	2.5	2.46602	7.0E-05	0.56531	0.67686	3.3E-04	1.5E-04
α	-0.5	-0.5111	6.9E-05	8.53651	8.526253	5.8E-05	9.0E-05
Amplitud	-0.5	-0.4805	7.4E-05	9.22965	9.214704	7.0E-05	2.4E-04

Cadro 1: Parámetros de ajuste predichos por el modelo y los encontrados realmente, además del valor del χ^2 de ajuste.

Vemos un gran acuerdo entre los resultados de la modelización de [13], siendo del mismo orden de magnitud y con una coincidencia en la primera cifra significativa en su mayoría. Lo único que parece no seguir esta tónica es la ordenada en el origen variando el número de osciladores, que aún así se corresponde muy bien con una recta. Estas diferencias pueden deberse al método de resolución de las ecuaciones diferenciales en cada estudio, ya que en esos momentos la precisión no era tan alta como actualmente donde podemos usar pasos de tiempo varios órdenes de magnitud menores.

Lo que vemos finalmente es una dependencia del tipo:

$$T_R = 0.97 \frac{N^{2.46602}}{\alpha^{0.5111} a^{0.4805}}. \quad (51)$$

5. Conclusiones.

Hemos podido recrear los principales resultados del histórico experimento computacional de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou estudiando su motivación, expectativas y las características del sistema hallado finalmente. Sin embargo, hemos podido realizar dichas simulaciones con una mayor precisión y adaptabilidad a diferentes circunstancias para explorar todos sus aspectos o sistemas derivados, lo cual nos ha llevado al mundo de la simulación no lineal (no abordado en el trabajo escrito, pero vital para la realización de las simulaciones) y la representación visual de resultados. Además, estudiamos las bases de la teoría que daba explicación a los resultados obtenidos, la cual nos ha llevado a artículos que han generado un gran progreso en diversos campos de la física, más concretamente en la teoría de sistemas integrables clásicos y cuánticos; culminando con el estudio de la ecuación de KdV, la física de solitones y los sistemas integrables, al igual que a continuar por esta línea de estudio en un futuro.

Como se puede observar, es una buena forma de introducirse en la física de sistemas no lineales integrables tanto de teóricamente como con métodos numéricos de resolución y una buena herramienta de estudio de los mismos de forma conceptual y más aproximada de lo que a primera impresión pudiera parecer.

Debido a estos motivos, este ha sido un sistema ampliamente estudiado, llevando a la creación de muchos otros campos de la física y creando un interés que ha desembocado en nuevas herramientas de estudio de temas de tanta actualidad como la superconductividad o de tanto uso habitual como las fibras ópticas.

Aún con todo, este sistema sigue siendo materia tanto de trabajos de fin de grado o de máster a lo largo del mundo como de investigación dado su gran carácter didáctico y “simple” conceptualización para el estudio de características de otros sistemas. Se podría decir que es el oscilador armónico reinventado.

Bibliografía

- [1] V. Borrero Mayora, “Investigación del problema de Fermi-Pasta-Ulam”, *Universidad Nacional de Educación a Distancia*, 2017.
- [2] T. Dauxois, “Fermi, Pasta, Ulam, And a Mysterious Lady”, *École Normale Supérieure, Lyon*, American Institute of Physics, 2008.
- [3] J. B. Marion, “Dinámica clásica de las partículas y sistemas”, *University of Maryland*, Editorial Reverté, 1998, cap. 13.
- [4] T. Dauxois, M. Peyrard and S. Ruffo, “The Fermi–Pasta–Ulam numerical experiment: history and pedagogical perspectives”, *Dipartimento di Energetica, S Stecco and CSDC, Università di Firenze and INFN*, European Journal of Physics, 2005.
- [5] D. Sholl., “Modal coupling in one-dimensional anharmonic lattices.”, *Physics Letters*, pp. 253-257, 1990.
- [6] E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam, M. Tsingou, “Studies Of Nonlinear Problems”, *University Of California*, 1955.
- [7] Ya Shnir, “Introduction to Solitons”, *University Of Olldenburg and BSU Miinsk, Institute of Theoretical Physics and Astronomy Vilnius*, 2013.
- [8] A. Muñuzuri, “Apuntes de Física Computacional”, *USC*, 2020.
- [9] Wikipedia, “Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou problem”, *Wikipedia*, sección 3.
- [10] N. J. Zabusky, M. D. Kruskal, “INTERACTION OF “SOLITONS” IN A COLLISIONLESS PLASMA AND THE RECURRENCE OF INITIAL STATES”, *Bell Telephone Laboratories y Princeton University Plasma Physics Laboratory*, Physics Review Letters, 1965.
- [11] R. M. Miura, C. S. Gardner, M. D. Kruskal, “Korteweg-de Vries Equation and Generalizations. II. Existence of Conservation Laws and Constants of Motion”, *Princeton University Plasma Physics Laboratory*, Journal of Mathematical Physics, 1967.
- [12] C. Y. Lin, S. N. Cho, C. G. Goedde, S. Lichter, “When Is a One-Dimensional Lattice Small?”, *Northwestern University, DePaul University*, Physics Review Letters, 1998.
- [13] M. Toda, “Theory of Nonlinear Lattices”, *Tokyo University of Education*, Springer-Verlag, 1981.
- [14] M. Tsutsumi, T. Mukasa y R. Iino, “On the Generalized Korteweg-de Vries Equation”, *Department of Applied Physics, Waseda University, Tokyo*, Proc. Japan Acad., 1970.