

Dispersión caótica

Daniel Estrada Acevedo,

* Universidad de Antioquia - Instituto de Física, Med-Col (e-mail:
daniel.estrada1@udea.edu.co)

Resumen

En el presente trabajo se estudia el fenómeno de dispersión de un sistema regido por el potencial no lineal $x^2y^2e^{-(x^2+y^2)}$. Algunas trayectorias son trazadas computacionalmente de forma que se aprecia una gran sensibilidad a las condiciones iniciales del sistema; también se presentan gráficos del ángulo de dispersión y tiempo de escape para varios valores del parámetro de impacto y de la energía del sistema. Se podrá ver que la energía en este sistema actúa como un parámetro de control que determina si el sistema tiene un comportamiento caótico. Finalmente, Se presenta un método que permite calcular el mayor exponente de Lyapunov, con esto se determina que es plausible afirmar que el sistema es caótico.

Keywords: Dispersión, caos, ángulo de dispersión, tiempo de escape, parámetro de impacto, exponente de Lyapunov.

1. INTRODUCCIÓN

El estudio de la dispersión de cuerpos masivos en presencia de un potencial de interacción externo es un tema fundamental en el campo de la física y astronomía, este fenómeno permite a partir de la cinemática de los cuerpos determinar características importantes del sistema como por ejemplo la forma del potencial. Claramente, los problemas reales relacionados con dispersión son mucho más complejos que los que se suelen abordarse teóricamente en sistemas físicos como los de mecánica celeste, mecánica atómica y molecular, mecánica de fluidos, entre otros [2]. Encontrar procesos de dispersión no lineales es algo usual. Dentro de estos procesos de dispersión, puede haber aquellos altamente susceptibles a variaciones en las condiciones iniciales, de tal forma que las predicciones de la mecánica del sistema sean irregulares o aparentemente azarosas, sin embargo, totalmente deterministas. Estos se denominan procesos de *dispersión caótica*.

Para el análisis de estos sistemas de dispersión lo que suele hacerse es obtener una relación entre una variable que contiene la información inicial del sistema, y una variable que carga consigo el estado final del mismo. En este caso se utilizará como variable de entrada la posición inicial en el eje y la cual se denota con la letra (b), esta variable se conoce como el *parámetro de impacto*. Como variables de salida se toman dos parámetros importantes en el sistema: el *ángulo de dispersión* (ϕ) y el *tiempo de escape* (t_e).

Se trabajará con un potencial no lineal dado por (2). Para visualizar las principales características de estos sistemas de dispersión caótica. El objetivo de este informe es entonces analizar computacionalmente el movimiento de una partícula de masa M dentro de este potencial y a partir de esto obtener gráficos de ϕ y t_e en función de b . También se presentará un método para estimar el valor del mayor *exponente de Lyapunov* del sistema, esto permitirá reafirmar la cualidad caótica del sistema presentado.

2. MARCO TEÓRICO

2.1 Dinámica del problema

La dispersión de una partícula puntual con masa M dentro de un potencial $V(\mathbf{r})$ se describe mediante el sistema de ecuaciones (1)[1].

$$M \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla V(\mathbf{r}),$$
$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt},$$
(1)

donde

$$V(\mathbf{r}) = V(x, y) = x^2y^2e^{-(x^2+y^2)}. \quad (2)$$

Se nota entonces que existen 4 coordenadas necesarias para determinar el estado del sistema, sin embargo, si se establece la conservación de la energía como una ligadura, entonces los grados de libertad se pueden reducir a 3 con la ecuación (3)

$$|\mathbf{v}| = \sqrt{\frac{2(E - V(\mathbf{r}))}{M}}. \quad (3)$$

Basta entonces integrar las ecuaciones de movimiento y determinar el comportamiento del sistema.

El potencial (2) es un ejemplo para el cual el sistema presenta características caóticas, una gráfica de este potencial se muestra en Fig.1, se puede ver que existen 4 picos que corresponden a un valor de energía $E_m = Me^{-2}$ ubicados en los puntos $(\pm 1, \pm 1)$.

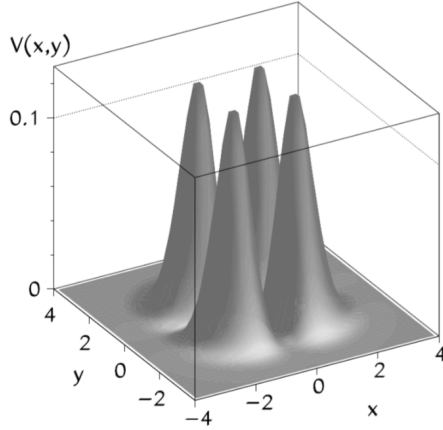


Figura 1. Potencial $V(x,y) = x^2 y^2 e^{-(x^2+y^2)}$, Imagen tomada de [1]

2.2 Dispersión

Una partícula de masa M que se lanza desde el infinito hacia una región en la cual existe un potencial $V(r)$ sufrirá una desviación en su trayectoria debido a la interacción con este.

Interesa conocer la relación entre alguna variable que represente el estado del sistema antes de la dispersión con otra variable que lo represente luego de la misma [3]. El estado inicial puede ser totalmente representado por el parámetro de impacto (b) y la energía inicial de la partícula E , el estado final se describe mediante el ángulo de desviación ϕ relativo a la dirección de incidencia. Otra variable de interés en este tipo de problemas es el tiempo de escape (t_e), definido como el tiempo que transcurre entre la entrada y salida de la partícula de una región efectiva del potencial, esta región es tal que se puede considerar que el potencial es nulo fuera de ella y por ende la partícula se moverá con movimiento uniforme.

2.3 Caos

La teoría del caos es un campo estudio que permea muchas áreas de la ciencia. A groso modo se puede decir que existen ciertos criterios que ya han sido establecidos para determinar cuándo un sistema puede clasificarse como caótico o no, en el caso de los sistemas deterministas el caos se manifiesta en la alta sensibilidad de la evolución del sistema a las condiciones iniciales [6].

El exponente de Lyapunov : teóricamente los exponentes de Lyapunov dan cuenta de la rata a la que, en un sistema caótico dos trayectorias con condiciones iniciales muy cercanas pueden terminar evolucionando de forma totalmente diferente. Este exponente es una signature del caos pues da cuenta de la sensibilidad en las condiciones iniciales, característica importante en un sistema caótico[5]. Suponga que en el sistema se toman dos condiciones iniciales separadas una distancia d_0 muy pequeña, si el sistema presenta cualidades caóticas entonces la evolución temporal de estas condiciones iniciales resultará en dos trayectorias cuya separación d crece exponencialmente en

cada paso temporal, es decir, la separación entre las trayectorias evoluciona de la forma[6]:

$$d(t) = d_0 e^{\lambda t}.$$

Donde λ es el mencionado exponente de Lyapunov. El concepto puede extenderse a mapas de más dimensiones y por ende puede existir un espectro de exponentes de Lyapunov, sin embargo, si solo se esta interesado en el caracter caótico del sistema basta investigar el mayor de estos y determinar si las trayectorias divergen ($\lambda > 0$) o convergen ($\lambda \leq 0$). Se puede definir el exponente de Lyapunov mediante la expresión[6].

$$\lambda = \frac{1}{t_n - t_o} \sum_{k=0}^n \ln \left(\frac{d(t_k)}{d(t_{k-1})} \right) \quad (4)$$

3. PROCEDIMIENTO

3.1 Evolución del sistema

Mediante de las ecuaciones de movimiento (1) se determina la evolución de las variables de estado del sistema integrando numéricamente. El método que se utiliza en este caso es *Runge-Kutta de cuarto orden*, que sirve para resolver ecuaciones de primer orden. Mediante este se integra el sistema de ecuaciones en pasos de tiempo determinados. El método de integración se describe a continuación[7].

Runge-kutta de cuarto orden Se pretende resolver el problema de valor inicial.

$$\begin{aligned} x'(t) &= f_1(t, x, y, v_x, v_y), \\ y'(t) &= f_2(t, x, y, v_x, v_y), \\ v'_x(t) &= f_3(t, x, y, v_x, v_y), \\ v'_y(t) &= f_4(t, x, y, v_x, v_y), \end{aligned}$$

con $x(0) = x_0, y(0) = y_0, v_x(0) = v_{0x}, v_y(0) = v_{0y}$. El método RK4 permite integrar en pasos de tiempo h mediante la siguiente relación.

$$\begin{pmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \\ v_{xi+1} \\ v_{yi+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ v_{xi} \\ v_{yi} \end{pmatrix} + \frac{h}{6} \begin{pmatrix} K_{11} & \dots & K_{14} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{41} & \dots & K_{44} \end{pmatrix}^T,$$

donde

$$\begin{aligned} K_{1j} &= f_j(t, x_i, y_i, v_{xi}, v_{yi}), \\ K_{2j} &= 2f_j(t + \frac{h}{2}, x_i + \frac{1}{2}K_{11}, \dots, v_{yi} + \frac{1}{2}K_{14}), \\ K_{3j} &= 2f_j(t + \frac{h}{2}, x_i + \frac{1}{2}K_{21}, \dots, v_{yi} + \frac{1}{2}K_{24}), \\ K_{4j} &= f_j(t + h, x_i + \frac{1}{2}K_{31}, \dots, v_{yi} + \frac{1}{2}K_{34}). \end{aligned}$$

Una vez se pueden integrar las ecuaciones de movimiento se procede entonces a trazar las trayectorias. Note que antes se mencionó que a partir de la conservación de la energía (3), puede omitirse la integración de alguna de las dos componentes de la velocidad, sin embargo, acá se integrará y se chequeará que el método de integración permita garantizar en lo posible dicha conservación.

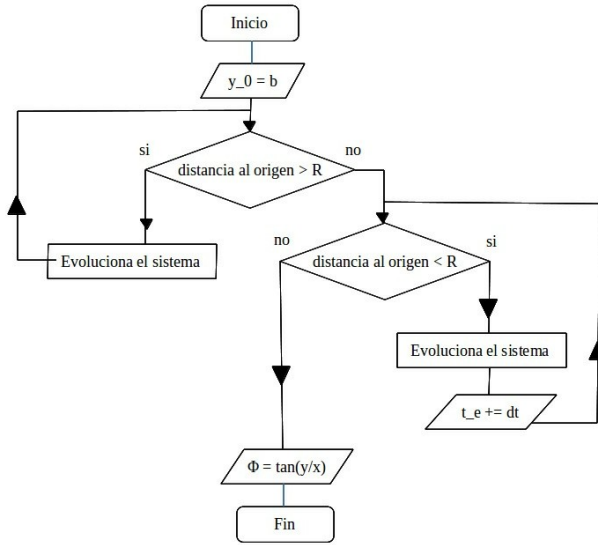


Figura 2. Diagrama del algoritmo para calcular las variables ϕ y t_e en función de b . La evolución del sistema se hace mediante RK4.

3.2 Variables de dispersión

Como ya se había mencionado se quiere obtener además de las trayectorias de la partícula las gráficas de ángulo de dispersión y tiempo de escape en función del parámetro de impacto (ϕ vs b y t_e vs b), para ello hace falta definir una región en la cual se determina que la interacción con el potencial es despreciable.

Para la determinación de las variables ϕ y t_e se establece la *región efectiva del potencial* como un círculo de radio R centrado en el origen de coordenadas de tal forma que la partícula al salir de esta región no tenga la posibilidad de volver a entrar (esto quiere decir que el radio de esta circunferencia debe al menos abarcar los cuatro picos del potencial), con esto se tiene entonces una referencia para medir las variables. El tiempo de escape se comienza a contar desde el momento en el que la partícula entra a la región mencionada y se detiene cuando sale de esta. Al mismo tiempo que se detiene el contador del tiempo de escape se calcula el ángulo de dispersión con el que la partícula salió de la región. Esto es simplemente calcular $\tan(\frac{y}{x})$.

El cálculo de ϕ y t_e se realiza entonces para varios valores de b y con esto se obtiene la gráfica deseada. Un esquema del algoritmo se presenta en diagrama de flujo (Fig.2).

3.3 Exponente de Lyapunov

En los sistemas en los cuales las ecuaciones de movimiento son conocidas, el procedimiento para calcular los exponente de Lyapunov es relativamente sencillo si lo que se quiere es estudiar el carácter caótico del sistema, pues solo es necesario conocer el mayor de estos exponentes y determinar si es positivo o no. Ya existen algoritmos sencillos que no requieren cálculos explícitos de matrices de derivadas parciales[6].

En la sección 2.2 se discutió que el exponente de Lyapunov se relaciona con la separación de las órbitas que tiene condiciones iniciales cercanas, por ende el algoritmo usual para el cálculo del mayor exponente se basa en la idea general de realizar un promedio con los logaritmos de la tasa de separación de las órbitas con condiciones iniciales muy cercanas (4)[4]. Este proceso tiene en consideración la condición de que las partículas de estudio permanezcan dentro de la región del atractor el tiempo suficiente como para hacer una buena estadística. Claramente en este sistema esto no ocurre, pues el tiempo que le toma a la partícula entrar y salir de la región del potencial es finito y no muy grande debido a la inexistencia de estados ligados.

Por lo anterior se plantea un método alternativo para estimar el exponente[6]. Cuando un sistema tiene un exponente de Lyapunov positivo, existe un "horizonte de tiempo" ($t_{horizon}$) en el cual se dice que la predictibilidad del sistema se rompe (Fig.3), lo que debe hacerse entonces es imponer un valor de tolerancia para establecer en que momento se considera que se da este rompimiento. Sea a esta distancia máxima, esto quiere decir que cuando la separación entre las trayectorias de dos condiciones iniciales muy cercanas (separadas, dígame una distancia d_0) supere el valor a , entonces se dice que la predictibilidad del sistema se rompe. Lo interesante en este concepto es que para los sistemas deterministas que presentan cualidades caóticas, este valor de $t_{horizon}$ es prácticamente independiente de las condiciones iniciales, exceptuando pequeñas fluctuaciones, por lo cual se puede hacer una medida estadística del exponente de Lyapunov usando (5).

$$t_{horizon} = \frac{1}{\lambda} \log\left(\frac{a}{d_0}\right). \quad (5)$$

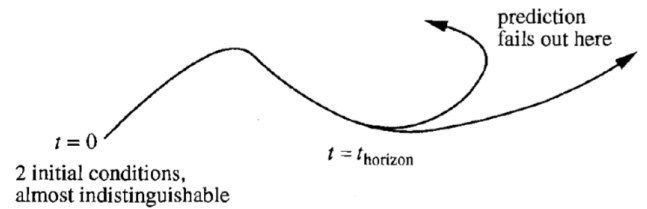


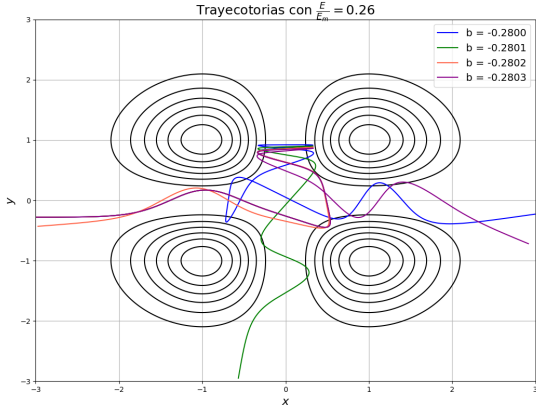
Figura 3. Esquema de rompimiento de predictibilidad de dos trayectorias cercanas luego de pasado un tiempo igual a $t_{horizon}$. Imagen tomada de [6].

4. RESULTADOS Y ANALISIS

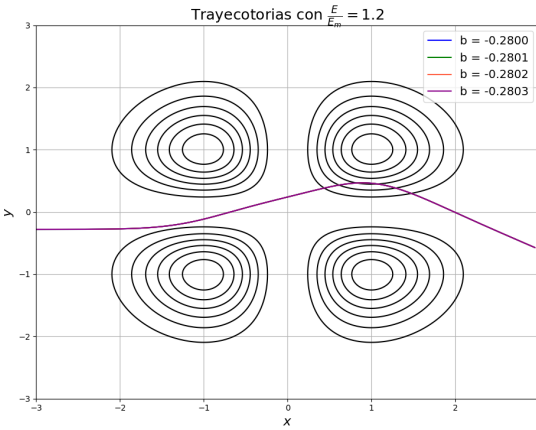
Por facilidad se escoge una partícula de masa unitaria que viaja con una dirección de incidencia paralela al eje x , de esta forma, el parámetro de impacto corresponde entonces a la posición inicial en el eje y , con esto es claro que $v_{0y} = 0$ y también que el valor máximo de energía corresponde a $E_m = e^{-2}$. La región efectiva del potencial se define como la circunferencia de radio $R = 3$ y la posición inicial en $x = 5R$.

Lo primero que se hizo fue integrar las ecuaciones de movimiento con RK4 en pasos de tiempo de $0,01(s)$. Las trayectorias obtenidas se muestran en Fig. 4, se puede notar que para el sistema con energía $E = 0,26E_m$ existen características caóticas mientras que para el sistema con

$E = 1,2E_m$, no. Esto era de esperarse pues si la energía de la partícula supera el potencial máximo esta podrá penetrar sin mucha dificultad la región del potencial.



(a) $E < E_m$.

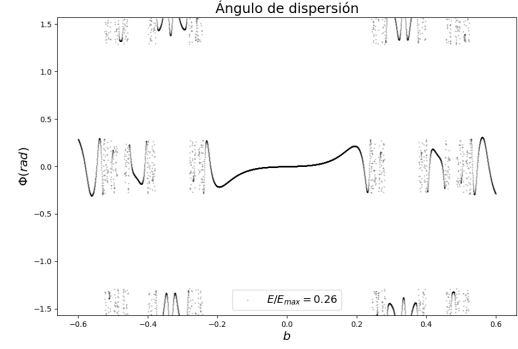


(b) $E > E_m$.

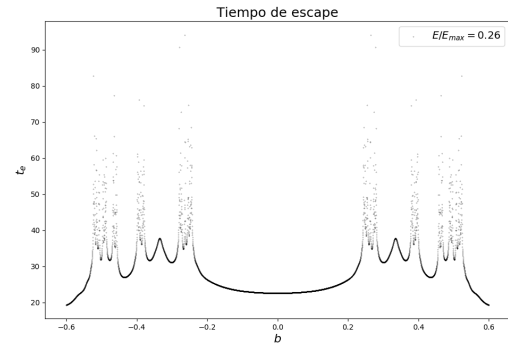
Figura 4. Trayectorias con parámetro de impacto $b_i = 0,28 + i * 1 \times 10^{-4}$, $i = 1, 2, 3, 4$. En (b) no se pueden distinguir las 4 orbitas.

El ángulo de dispersión y el tiempo de escape se calcula para valores de b en el intervalo $[-0.6, 0.6]$ con pasos de orden 10^{-5} . Se toman dos casos, el primero (Fig.8a y 8b) corresponde a un sistema con $E < E_m$, se puede apreciar que para esta energía el sistema en unas regiones es muy sensible a cambios en b , es decir, tiene alta sensibilidad a la condición inicial lo cual es un indicio de caos. El segundo caso (Fig.6a y 6b) es para $E > E_m$, aquí se puede ver que las gráficas son regulares y por tanto decir que no hay ningún indicio de caos en este caso.

Con las gráficas de las variables de dispersión se puede notar que E actúa como un parámetro de control en este sistema, es decir, existen un valor de energía a partir del cual el sistema deja de tener características caóticas. Para corroborar esto se presenta un gráfico de bifurcación (Fig.7) en el cual se aprecia que a partir de $E = 1,16E_m$ no hay sensibilidad a las condiciones iniciales. En esta gráfica la energía inicial del sistema es variada en el intervalo $[0, 2E_m]$ y para cada valor de esta se procede a calcular



(a)



(b)

Figura 5. Diagramas de las variables de dispersión (a) ϕ vs b y (b) t_e vs b para $E = 0,26E_m$

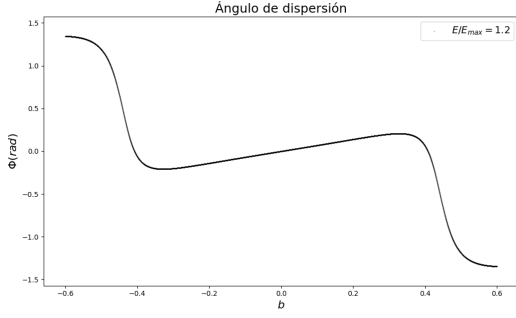
cuantos valores de b entre -1 y 1 en pasos de 2×10^{-3} son inciertos[3]. El término "punto incierto" hace referencia a que es una condición inicial en la cual una variación muy pequeña genera una evolución muy distinta del sistema, en otras palabras, es un punto caótico. Para determinar si el punto es incierto o no se comparan dos valores de b contiguos y si la diferencia entre los ángulos de dispersión es grande se toma como un punto incierto, si no, se toma como regular. En este caso se estableció un $\Delta\phi = 0,2(\text{rad})$ como la cota para ser un punto regular.

Notese una característica muy particular del sistema. Si se hace un zoom (se gráfica en una escala de mayor resolución), por ejemplo, en las gráficas correspondientes a $E = 0,26E_m$ (Fig.8), se obtiene un patrón muy similar en el comportamiento de las variables de dispersión, esto es un indicio de que estos diagramas de estado presentan cualidades *fractales* y por ende es un indicio de que el sistema es caótico[6].

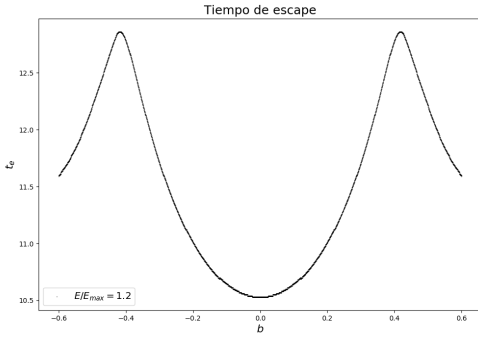
El último valor de importancia a calcular fue el exponente de Lyapunov, para esto se utilizó el método que usa $t_{horizon}$ mencionado en sección 3.3. Se calculó el valor del tiempo de horizonte para diferentes valores de b en el intervalo $[-1, 2, 1, 2]$ en pasos del orden de 10^{-5} y con (5) se estimó λ . Estos valores fueron promediados y se obtuvo que $\lambda = 0,088 > 0$.

5. CONCLUSIONES

El parámetro clave en este sistema es el valor inicial de la energía E . Se vio que el carácter caótico o no de la



(a)



(b)

Figura 6. Diagramas de las variables de dispersión (a) ϕ vs b y (b) t_e vs b para $E = 0,26E_m$

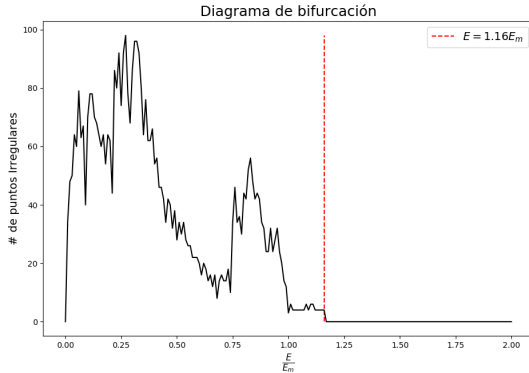
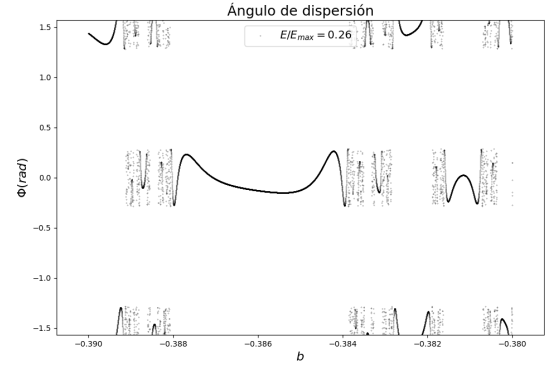
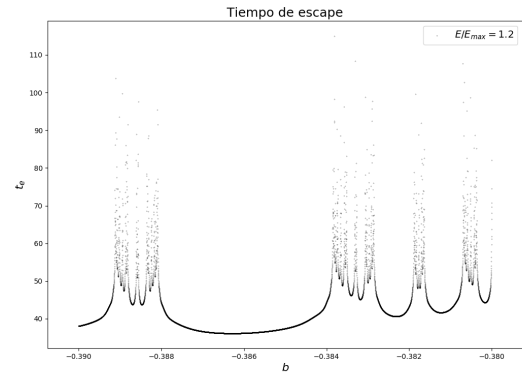


Figura 7. Diagrama de bifurcación para E .

interacción de la partícula con el potencial(2) depende de si esta viaja con una energía que supera a la energía correspondiente al máximo de potencial. En Fig.7 se dedujo que el valor crítico de la energía era $E_c = 1,16E_m$, sin embargo, el valor crítico debe corresponder exactamente a $E_c = E_m$ ya que a partir de este valor la partícula podrá penetrar la región del potencial sin mucho problema. La falla en este calculo se presenta por el $\Delta\phi$ escogido, como los puntos $(\pm 1, \pm 1)$ corresponden a puntos inestables del potencial una variación pequeña de la posición al rededor de este punto genera una evolución incierta del sistema, esto no significa que el sistema en ese caso sea caótico pero el algoritmo que calcula los puntos inciertos no fue programado para tener esto en cuenta.



(a)



(b)

Figura 8. Zoom de los diagramas de las variables de dispersión (a) ϕ vs b y (b) t_e vs b para $E = 0,26E_m$.

Como se mostró, para valores de $E < E_m$ el sistema presenta alta sensibilidad a las condiciones iniciales y además el exponente de Lyapunov calculado es un numero positivo, con esto es posible afirmar que el sistema en este regimen de energía es con una alta probabilidad un sistema caótico[6]. También puede decirse que a medida que b se aleja del cero geométrico el sistema se vuelve más susceptible a los cambios, lo que es de esperarse pues por la simetría del problema la región central actúa como una especie de pozo de potencial, esto se puede ver en las gráficas de ϕ y t_e .

Para poder afirmar con certeza que el sistema se puede clasificar como caótico hace falta corroborar que los diagramas de estado del sistema, en este caso ϕ y t_e vs b , tengan características fractales como se conjetura a partir de Fig.8.

REFERENCIAS

- [1] SIRCA, SIMON AND HORVAT, MARTIN. *Computational methods for physicists: compendium for students*, Springer Science & Business Media, 2012, páginas 391-392.
- [2] SEOANE, JESÚS M AND SANJUÁN, MIGUEL AF. *New developments in classical chaotic scattering*, Reports on Progress in Physics, vol 76, number 1, 2012, doi:10.1088/0034-4885/76/1/016001

- [3] YALÇINKAYA, TOLGA AND LAI, YING-CHENG, *Chaotic scattering*, Computers in Physics, vol 9, number 5, pages (511-539), 1995. doi: 10.1063/1.168549
- [4] J. C. SPROTT, *Chaos and Time-Series Analysis*, Oxford University Press, pages (pp.116-117), 2003, tomado de <http://web.archive.org/web/20080207010024/http://www.808multimedia.com/winnt/kernel.htm>.
- [5] A5MOON, FRANCIS C, *Chaotic and fractal dynamics: introduction for applied scientists and engineers*, Cornell University, 2008.
- [6] STROGATZ, STEVEN H., *Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry and engineering*, 1994. ISBN 0-201 -54344-3
- [7] BURDEN, RICHARD L AND FAIRES, J DOUGLAS, *Numerical Analysis*, Brooks. Cole, Belmont, CA. 1997