

Marina Cláudia Martins dos Santos Hussein

**INTEGRAÇÃO GEOMÉTRICA: UMA
APLICAÇÃO À MECÂNICA CELESTE**

Universidade Portucalense
Departamento de Inovação, Ciência e Tecnologia

2008

Marina Cláudia Martins dos Santos Hussein

**INTEGRAÇÃO GEOMÉTRICA: UMA
APLICAÇÃO À MECÂNICA CELESTE**

Dissertação apresentada ao Departamento de Inovação, Ciência e Tecnologia da Universidade Portucalense como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Doutor em Matemática - Análise Numérica, sob a orientação do Prof. Doutor António Pascoal.

2008

À Begas, por todos os anos de dedicação

There comes a point in every exposition of numerical analysis when the theme shifts from the familiar mathematical progression of definitions, theorems and proofs to the actual ways and means whereby computational algorithms are implemented. This point is sometimes accompanied by an air of anguish and perhaps disdain: we abandon the palace of the Queen of Sciences for the lowly shop floor of a software engineer. *Nothing can be further than the truth!* Devising an algorithm that fulfils its goal accurately, robustly and economically is an intellectual challenge equal to the best in mathematical research.

Arieh Iserles

A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations, CUP, 1996

Agradecimentos

A escrita desta tese não seria possível sem o contributo e o apoio de algumas pessoas.

Em primeiro lugar, agradeço ao meu orientador, Prof. Doutor António Pascoal, por todo o apoio prestado ao longo destes quatro anos, nomeadamente, toda a disponibilidade e solicitude demonstrada de forma espontânea, as discussões sobre a escolha do tema e do problema a tratar e, também, a forma como finalizar o trabalho.

Agradeço as sugestões e comentários do Prof. Ernest Hairer, do Prof. Ben Leimkuhler e do Prof. Jerrold Marsden. Agradeço ao Simone Calogero pela leitura atenta do manuscrito, acompanhada das respectivas discussões e, por fim, ao Anwar, por todo apoio e incentivo, mesmo sem falar português.

Por fim, agradeço à Nelinha, pelas correcções na Língua Portuguesa e por tantos anos de amizade.

RESUMO

O objectivo desta tese é discutir e construir integradores geométricos que visam preservar as características qualitativas de uma equação diferencial, quando esta é discretizada. Em particular, mostra-se que para sistemas Hamiltonianos, os integradores simplécticos demonstram uma vantagem evidente. Isto é ilustrado pelo desenvolvimento de novas variantes do método de Euler simpléctico e do método Störmer-Verlet, ambos adaptativos e não-adaptativos, os quais produzem uma integração explícita e semi-implícita da Hamiltoniana não separável para as equações do problema de Hill.

Em primeiro lugar, explora-se a ideia da integração geométrica, discutem-se algumas das suas vantagens e desvantagens, e sumarizam-se características qualitativas relevantes a ser preservadas pelo integrador, quando comparados com os integradores clássicos, na integração de um sistema Hamiltoniano. Tais objectivos são ilustrados com alguns exemplos, tais como o exemplo clássico do pêndulo e o problema de Kepler. De seguida, desenvolvem-se alguns (mas não de forma exaustiva) resultados teóricos em sistemas com estrutura Hamiltoniana. Embora tal possa parecer, de certa forma, uma fuga ao tema principal da tese em integração geométrica, é essencial saber e compreender as características qualitativas do sistema Hamiltoniano, de forma a construir-se integradores que lhe preservem a estrutura. No seguimento, fornece-se uma informação detalhada de alguns métodos numéricos, nomeadamente, os métodos de Euler explícito e implícito, o método de Euler simpléctico, a regra do ponto médio implícita, a família Runge-Kutta e, em particular, o método Störmer-Verlet. Quando se faz a inclusão de algum método numérico na classe dos integradores geométricos ou não geométricos, fundamenta-se tal decisão com a descrição das características qualitativas preservadas.

A última parte da tese é dedicada o problema de Hill, o qual modela o movimento no sistema solar de dois corpos próximos, que se movem em órbitas circulares à volta de um terceiro corpo, muito maior e situado a uma grande distância. Numa primeira etapa, descrevem-se as equações do movimento e as curvas de Hill. De seguida, desenvolvem-se métodos simplécticos para o problema, demonstrando-se, usando diversos resultados numéricos, que os métodos com passo de integração variável preservam aproximadamente a energia do sistema Hamiltoniano, mas de uma forma mais eficiente e precisa que os métodos tradicionais.

ABSTRACT

The objective of this thesis is to discuss and construct geometric integrators that aim to preserve the qualitative features of a differential equation when it is discretised. In particular, we show that for Hamiltonian systems, symplectic integrators have a clear advantage. This is illustrated in the development of new variants of the symplectic Euler and Störmer-Verlet methods, both adaptive and non-adaptive, which enables explicit and semi-explicit integration of the non-separable Hamiltonian for the equations of Hill's problem.

We first explore the idea of geometric integration and discuss some of the advantages and disadvantages and summarise the qualitative features that are preserved by the integrator, in comparison with several of the classical numerical integrators as applied to a Hamiltonian system. We demonstrate this with several examples, including that of the classical pendulum and Kepler's problem. We then develop some (though by no means exhaustive) essential theoretical results for systems with Hamiltonian structure. Although this may seem to be somewhat of a diversion from the main theme of the thesis on geometric integration, it is essential to understand the characteristic features of the Hamiltonian system, in order to construct structure-preserving algorithms. Next, we give a detailed description of several important numerical methods, namely, explicit and implicit Euler, symplectic Euler, the implicit midpoint rule, the Runge-Kutta family, and in particular, Störmer-Verlet. We then categorise the methods into geometric and non-geometric integrators by outlining the qualitative feature that it preserves.

The last part of the thesis is dedicated to Hill's Problem which models the motions in the solar system in which two nearby bodies move in nearly circular orbits about another much larger body at a great distance. First we describe the equations and Hill's curves. We then develop the symplectic methods for the problem and demonstrate using several numerical experiments that the resulting adaptive methods nearly preserve the total energy for the Hamiltonian system more efficiently and accurately than the traditional methods.

Conteúdo

Agradecimentos	i
Resumo	ii
Abstract	iii
Tabela de Conteúdos	iv
Lista de Figuras	vii
Lista de Tabelas	xi
1 Introdução	1
1.1 Qual o interesse da integração geométrica?	2
1.2 Exemplos comparativos de integradores clássicos vs. integradores geométricos . .	5
1.3 Quais as características qualitativas a preservar?	10
2 Sistemas hamiltonianos e lagrangianos	14
2.1 As equações de Euler-Lagrange e as equações de Hamilton	15
2.2 Leis de conservação	20
2.2.1 Lei de conservação da energia	20
2.2.2 Teorema de Noether	21
2.2.3 Simplecticidade	23
3 Métodos numéricos	30

3.1	Métodos de Euler: explícito, implícito e simplético	31
3.1.1	O método θ : métodos de Euler explícito e implícito	31
3.1.2	O método de Euler simplético	33
3.2	Métodos Runge-Kutta: explícitos, implícitos e particionados	34
3.2.1	Métodos Runge-Kutta explícitos	34
3.2.2	Métodos Runge-Kutta implícitos	37
3.2.3	Métodos Runge-Kutta particionados	41
3.3	Método Störmer-Verlet	45
3.3.1	Método Störmer-Verlet aplicado a sistemas com Hamiltoniana separável .	45
3.3.2	Método Störmer-Verlet aplicado a sistemas com Hamiltoniana não separável ou geral	49
4	Integradores geométricos	50
4.1	As equações de Euler-Lagrange discretas e os sistemas hamiltonianos discretos .	54
4.2	Leis de conservação em sistemas discretos	59
4.2.1	Conservação da forma-2 simplética	59
4.2.2	Conservação das funções quantidades de movimento	59
4.2.3	Conservação da energia	60
4.3	A análise retrospectiva do erro	61
4.4	Os integradores geométricos	63
4.4.1	Os métodos de Euler simpléticos	64
4.4.2	A regra do ponto médio implícita	65
4.4.3	Métodos Runge-Kutta simpléticos	68
4.4.4	Métodos Runge-Kutta particionados	71
4.4.5	Métodos Runge-Kutta-Nyström	73
4.4.6	O método Störmer-Verlet	75
4.5	Passo de integração adaptativo	81
5	O problema de Hill	83

5.1	O problema dos n corpos	84
5.1.1	Equações do movimento	85
5.2	O problema geral dos três corpos	89
5.2.1	Equações do movimento	90
5.3	O problema restrito dos três corpos	91
5.3.1	Equações do movimento	92
5.3.2	As equações do movimento hamiltonianas	99
5.3.3	Equações do movimento em função de variáveis complexas conjugadas	102
5.3.4	Curvas de Hill e pontos de equilíbrio	102
5.3.5	A função $\Omega(x, y)$	105
5.3.6	Regiões do movimento	105
5.3.7	Soluções periódicas	108
5.3.8	Modificações ao problema restrito	113
5.4	O problema de Hill	114
5.4.1	As equações do movimento	114
5.4.2	Equações hamiltonianas do movimento	118
5.4.3	Equações do movimento em função de variáveis complexas conjugadas	118
5.4.4	Pontos de equilíbrio e a função $\Omega(x, y)$	119
5.4.5	Curvas de Hill e as regiões do movimento	120
6	Integração numérica do problema de Hill	122
6.1	Comparação entre métodos simpléticos e não simpléticos, com passo de integração fixo	123
6.1.1	Resultados numéricos com os métodos clássicos	126
6.1.2	Resultados numéricos com o método de Euler simplético	129
6.2	Comparação entre métodos simpléticos com passo de integração fixo	132
6.2.1	Resultados numéricos com o método Störmer-Verlet geral	135
6.2.2	Resultados numéricos com a regra do ponto médio implícita	137
6.3	Comparação entre métodos simpléticos: com passo de integração fixo e adaptativo	139

6.3.1	O método de Euler simpléctico adaptativo para Hamiltonianas não separáveis	140
6.3.2	Resultados numéricos com o método de Euler simpléctico adaptativo . . .	142
6.3.3	O método Störmer-Verlet adaptativo para Hamiltonianas não separáveis .	149
6.3.4	Resultados numéricos com o método Störmer-Verlet adaptativo	151
6.4	Integração numérica no caso da possibilidade de escape	153
7	Conclusões	161
A	Programas	164
A.1	Método de Euler explícito	164
A.2	Método de Euler implícito	165
A.3	Regra do ponto médio implícita	166
A.4	Método Runge-Kutta de ordem 4	168
A.5	Método de Euler simpléctico	169
A.6	Método Störmer-Verlet	170
A.7	Método de Euler simpléctico adaptativo	170
A.8	Método Störmer-Verlet adaptativo	172
B	Método de Newton	175
	Bibliografia	176

Lista de Figuras

1.1	Erro na energia no problema de Kepler com o método de Euler explícito, com o método Runge-Kutta de ordem 4 e com o método Störmer-Verlet, respectivamente; as condições iniciais são $\mathbf{q} = (1, 0)^T$ e $\mathbf{p} = (0, 1)^T$, com passo $h = 10^{-3}$	9
1.2	Erro no momento angular no problema de Kepler com o método de Euler explícito, com o método Runge-Kutta de ordem 4 e com o método Störmer-Verlet, respectivamente; as condições iniciais são $\mathbf{q} = (1, 0)^T$ e $\mathbf{p} = (0, 1)^T$, com passo $h = 10^{-3}$	9
1.3	Solução das equações (1.5) para os métodos de Euler explícito, implícito e simpléctico, com condição inicial $(u, v) = (2, 2)$ e $h = 0.1$	10
5.1	Pontos colineares L_1, L_2 e L_3 e pontos triangulares L_4 e L_5 , para $\mu = \frac{1}{82.27}$	104
5.2	Curvas de Hill para o problema restrito, com $\mu = \frac{1}{82.27}$	109
5.3	Curvas de Hill para o problema de Hill	121
6.1	Trajectórias do terceiro corpo no problema de Hill, com método de Euler explícito e com o método de Euler implícito, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com passo de integração $h = 10^{-3}$, num total de 20000 passos.	126
6.2	Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, para os primeiros 1000 passos de integração, no método de Euler explícito e no método de Euler implícito, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com passo de integração $h = 10^{-3}$	127
6.3	Evolução do erro na Hamiltoniana, no problema de Hill, nos primeiros 300 passos de integração, no método de Euler explícito e no método de Euler implícito, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com passo de integração $h = 10^{-3}$	127
6.4	Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, no método Runge-Kutta de ordem 4, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$. A integração foi feita para 20000 e 200000 passos, respectivamente.	128

6.5	Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método RK4, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$. No segundo caso, para o eixo das ordenadas foi adoptada uma escala logarítmica.	129
6.6	Evolução do erro na Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método RK4, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	130
6.7	Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, no método de Euler simpléctico, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$. A integração foi feita para 20000 e 200000 passos, respectivamente.	131
6.8	Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	131
6.9	Evolução do erro na Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	132
6.10	Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	135
6.11	Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	136
6.12	Evolução do erro na Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	136
6.13	Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, com a regra do ponto média implícita, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	137
6.14	Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com a regra do ponto média implícita, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	138
6.15	Evolução do erro na Hamiltoniana, no problema de Hill, com a regra do ponto média implícita, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	138
6.16	Trajectória do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	143
6.17	Evolução da Hamiltoniana e da Hamiltoniana modificada, respectivamente, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	144

6.18	Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	144
6.19	Trajectória do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{3}{4}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.	145
6.20	Evolução da Hamiltoniana e da Hamiltoniana modificada, respectivamente, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{3}{4}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	145
6.21	Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{3}{4}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	146
6.22	Trajectória do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.	147
6.23	Evolução da Hamiltoniana e da Hamiltoniana modificada, respectivamente, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	147
6.24	Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$	148
6.25	Trajectória do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet adaptativo, para $r = \frac{1}{2}$, $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com $\varepsilon = 10^{-2}$	151
6.26	Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet adaptativo, para $r = \frac{1}{2}$, $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com $\varepsilon = 10^{-2}$	152
6.27	Evolução da Hamiltoniana modificada, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet adaptativo, para $r = \frac{1}{2}$, $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com $\varepsilon = 10^{-2}$	152
6.28	Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet adaptativo, para $r = \frac{1}{2}$, $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com $\varepsilon = 10^{-2}$	153

6.29	Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 30]$	154
6.30	Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 30]$	155
6.31	Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, ambos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 30]$	156
6.32	Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.36, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 10]$	156
6.33	Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 30]$	157
6.34	Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, ambos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 30]$	157
6.35	Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.5, 0.5)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 10]$	158
6.36	Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.5, 0.5)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 10]$	159
6.37	Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, ambos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.5, 0.5)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 10]$	159

Lista de Tabelas

3.1	Métodos Runge-Kutta de ordem 2	36
3.2	Método Runge-Kutta clássico	36
3.3	Método de Nyström	36
3.4	Método Runge-Kutta de ordem 4	37
3.5	Método Runge-Kutta implícito de ordem 2	38
3.6	Regra do ponto médio implícita	39
3.7	Método Runge-Kutta implícito de ordem 4	40
3.8	Método de Gauss-Legendre de ordem 6	40
3.9	Método Lobatto IIIA de ordem 4	40
3.10	Método Lobatto IIIB de ordem 4	41
4.1	Método Runge-Kutta implícito diagonal de ordem 5	71

Capítulo 1

Introdução

A maior parte dos fenómenos físicos são descritos por equações diferenciais ordinárias ou por equações diferenciais parciais. Na maioria dos casos, a solução geral destas equações não é conhecida, recorrendo-se a métodos numéricos para determinar as suas soluções. Um método ou integrador numérico é um algoritmo que substitui uma equação diferencial, que descreve a dinâmica contínua de um sistema, por equações-diferença que aproximam a trajectória verdadeira através de uma trajectória discreta.

O leque de métodos numéricos disponíveis é variado, em particular após o aparecimento e difusão do uso do computador. Nas últimas décadas, pareceu ter-se atingido uma certa maturidade no campo da integração numérica de equações diferenciais ordinárias, sendo corrente o uso de excelentes algoritmos, na sua maioria baseados em métodos Runge-Kutta ou métodos lineares multipasso. Em geral, o ênfase de tais algoritmos clássicos é colocado na estabilidade do método e na solução de compromisso entre o controlo do erro e a eficiência computacional. O problema central na integração numérica tradicional de sistemas de equações diferenciais ordinárias é calcular a solução de um problema num dado instante de tempo t , dadas as condições iniciais, da forma mais eficiente possível, respeitando uma dada tolerância para o erro global. A classe do integrador, a sua ordem e erro local, assim como o passo temporal, são desenhados, construídos e escolhidos com este propósito. No entanto, os métodos tradicionais ignoram todas as leis físicas contidas pela equação diferencial que estão a integrar numericamente. Por exemplo, a segunda lei de Newton, $m \frac{d^2x}{dt^2} = F(t, x, \frac{dx}{dt})$, contém mais informação do que a relação entre massa, aceleração e força - contém todas as propriedades físicas relevantes - nomeadamente, informação sobre o espaço de fase, o qual pode ser o espaço euclideano ou um espaço curvo; sobre simetrias do movimento, tais como as simetrias no movimento de um pêndulo; sobre quantidades, tais como a energia, indicando se são ou não conservadas; sobre a symplecticidade e a preservação do volume. Desde os finais dos anos 80 e início dos anos 90, o estudo e desenvolvimento de métodos numéricos que obedeçam, também, às leis físicas escondidas, tem sido uma área de

grande actividade e fértil em resultados.

Hoje em dia, a tecnologia disponível permite cálculos computacionais mais pesados, possibilitando soluções numéricas de longo prazo. Mas, o elevado número de passos, embora permita a obtenção de uma solução numérica no longo prazo, pode comprometer o sucesso da simulação. Em que sentido? Por exemplo, em sistemas dinâmicos hamiltonianos, atractores e repulsores no espaço de fase não são observáveis; no entanto, métodos tradicionais, tais como os métodos de Euler e de Runge-Kutta, quando aplicados a sistemas hamiltonianos, podem produzir trajectórias numéricas que implicam a existência de atractores e repulsores. Consequentemente, não é de estranhar a afirmação de que as propriedades qualitativas do integrador numérico são críticas para o sucesso da simulação [23].

Vislumbra-se, então, a pertinência e actualidade dos integradores geométricos, métodos que, ressaltando de erros de arredondamento, conservam as propriedades qualitativas associadas às soluções do sistema dinâmico em estudo, ou seja, na medida do possível, conservam o retrato da fase. Note-se o contraste entre a aproximação tradicional, centrada no compromisso entre o erro global e a eficiência computacional, e a aproximação feita a um dado problema pela integração geométrica: fixa-se um passo temporal (por vezes, moderadamente grande) e calculam-se órbitas de longo prazo, talvez com várias condições iniciais diferentes. Embora o erro global de cada órbita não seja pequeno, o retrato da fase produzido pode ser muito próximo, em algum sentido, do retrato da fase da equação diferencial.

1.1 Qual o interesse da integração geométrica?

Como explicar o interesse recente na integração geométrica, de áreas tão diversas como a astronomia, a dinâmica molecular, a mecânica, a física e a análise numérica?

Grosso modo, os métodos baseados na análise do erro não respeitam, necessariamente, as características qualitativas do problema subjacente à equação diferencial original, ao passo que os integradores geométricos incorporam essa informação qualitativa. Em termos simples, pretende-se que um integrador numérico, ao cumprir a sua função tradicional, vá mais além, e reproduza, pelo menos, certas características do sistema original. Já não é suficiente que o integrador numérico se limite a apresentar uma solução numérica; ambiciona-se, também, que essa solução numérica partilhe as características do sistema contínuo subjacente. Neste sentido, diz-se que a integração geométrica é sinónimo de uma integração que preserva a estrutura das equações diferenciais, isto é, os integradores numéricos partilham algumas das propriedades geométricas do fluxo exacto do sistema.

Há, de facto, alguns integradores já usados há décadas, tais como o Störmer-Verlet, que são também integradores geométricos; outros foram reajustados nesse sentido, ou então criados de raiz. Além da vantagem evidente da incorporação de características qualitativas, os integradores

geométricos são, muitas vezes, mais eficientes e mais fáceis de analisar, já que se pode explorar a teoria qualitativa subjacente à equação diferencial, a partir da análise retrospectiva do erro. Neste sentido, uma consequência directa da integração geométrica é o estudo de um sistema dinâmico «vizinho» do sistema dinâmico original, e na «classe» correcta; por exemplo, se o sistema de equações diferenciais é hamiltoniano, o fluxo numérico será solução de um sistema hamiltoniano vizinho. Aliás, a grande justificação da integração geométrica reside na análise retrospectiva do erro. Grosso modo, esta ferramenta teórica escreve o integrador numérico ψ_h como o fluxo de algum campo vectorial perturbado \tilde{f} , ou seja, $\psi_h(f) = \varphi(\tilde{f})$, onde φ representa o fluxo verdadeiro - a solução numérica é a solução exacta de um problema modificado. Se o método for de ordem p , então $\tilde{f} = f + O(h^p)$; conseqüentemente, em muitos casos pode argumentar-se que, se ψ_h pertencer a alguma classe (por exemplo, hamiltoniana), então o campo vectorial perturbado também pertencerá à mesma classe. Desta forma, sabe-se que, ao estudar a dinâmica do integrador numérico, está a estudar-se, no mínimo, a dinâmica na classe correcta. Por outro lado, quando a solução numérica de um sistema hamiltoniano for arbitrariamente próxima do fluxo exacto de um problema hamiltoniano perturbado, o erro de um método simpléctico não é arbitrário mas fortemente estruturado.

Os resultados obtidos tornaram evidente que a preservação das propriedades geométricas do fluxo, não só produz um comportamento qualitativo superior, como permite uma integração mais precisa no longo prazo. De facto, a preservação das propriedades qualitativas tem conseqüências indirectas, que têm sido observadas nos resultados obtidos ao longo destes últimos vinte anos, nomeadamente [30]:

- (i) os integradores geométricos que são simplécticos exibem um bom comportamento no que diz respeito à evolução da energia;
- (ii) os integradores simplécticos conservam a quantidade de movimento angular.

Pelo facto de se explorar a estrutura dos sistemas mecânicos, é possível utilizar integradores mais atractivos do ponto de vista teórico, mas também mais eficientes em termos computacionais e que exibam melhores propriedades em simulações de longo prazo, do que os integradores convencionais [47].

Pode dizer-se que o campo da integração geométrica é um campo de convergência de interesses de áreas tais como a Matemática Pura, a Análise Numérica, a Mecânica e a Engenharia. De facto, para se desenharem integradores geométricos exige-se o diálogo entre as mais diversas áreas; é necessário o *input* da geometria dos sistemas mecânicos e, também, o *input* da tradução dessa geometria em algoritmos eficientes e confiáveis.

As vantagens e desvantagens da integração geométrica podem ser sintetizadas da seguinte forma [21, 30, 32]. As vantagens principais são:

1. As simulações podem ser feitas no longo prazo, já que efeitos não físicos, tais como dis-

sipação de energia em sistemas conservativos, não têm lugar. Por exemplo, sistemas hamiltonianos preservam a energia, mas integradores simplécticos, em geral, não; no entanto, a análise retrospectiva permite concluir que, no longo prazo, o erro na energia oscila de forma limitada.

Os métodos numéricos gerais negligenciam a estrutura geométrica simpléctica dos sistemas hamiltonianos e, por isso, embora sejam poderosos na simulação de curto prazo dos fenómenos físicos, exibem severas limitações na integração de longo prazo.

2. Integradores geométricos confiáveis, simples e rápidos podem ser obtidos através do estudo da estrutura da equação diferencial em causa. Adicionalmente, podem ser obtidos métodos mais estáveis e/ou mais precisos do que os integradores tradicionais.
3. Em algumas situações, os resultados são qualitativamente correctos, mesmo quando o movimento é caótico.
4. Para alguns sistemas, os erros são muito mais pequenos do que com os integradores convencionais, tanto no curto, no médio como no longo prazo. Embora os integradores geométricos não tenham sido desenhados para controlar o erro global, por vezes ele cresce linearmente para um integrador simpléctico e de forma quadrática para um integrador clássico.
5. A preservação da estrutura pode produzir métodos mais robustos e que conduzam a melhores resultados qualitativos do que os métodos convencionais, mesmo se o erro numérico não for inferior.
6. A preservação da estrutura pode sugerir novas formas de computação consideradas impossíveis, como o é caso da integração de longo prazo de sistemas hamiltonianos.

O sumário das desvantagens é:

1. Em geral, para que um integrador obedeça a alguma lei física «escondida», ela tem de ser conhecida; por exemplo, para se preservar a energia, ela deve ser conhecida.
2. Os integradores geométricos podem tornar-se computacionalmente mais dispendiosos, já que se está a exigir mais do método; no entanto, e de forma surpreendente, algumas vezes eles são muito mais baratos do que os integradores clássicos.
3. As leis escondidas podem não ser todas preservadas pelo método; por exemplo, é bem conhecido o facto dos integradores geométricos com passo temporal fixo não poderem conservar, em simultâneo, a energia e a simplecticidade.
4. No caso de sistemas hamiltonianos, para se preservar a simplecticidade do fluxo é necessário que o passo de integração seja constante, o que pode constituir uma séria limitação.

1.2 Exemplos comparativos de integradores clássicos vs. integradores geométricos

Antes da apresentação dos exemplos comparativos, introduzam-se os conceitos de fluxo de um sistema dinâmico e fluxo numérico. O fluxo de um sistema dinâmico $\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{y})$ é a função que, para qualquer ponto \mathbf{y}_0 do espaço de fase, associa o valor $\mathbf{y}(t)$ da solução com o valor inicial $\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$. Esta função, representada por ψ_t , é definida por

$$\psi_t(\mathbf{y}_0) = \mathbf{y}(t) \quad \text{se} \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0. \quad (1.1)$$

Admita-se que para a equação diferencial em estudo não é possível encontrar a forma geral das suas soluções. Neste caso, recorre-se aos métodos numéricos, algoritmos que permitem calcular soluções que aproximam o fluxo do sistema. O método numérico mais simples é o método de Euler explícito

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_n), \quad (1.2)$$

onde h representa o passo temporal. Este algoritmo permite calcular aproximações $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots$ aos valores $\mathbf{y}(h), \mathbf{y}(2h), \dots$ da solução, dado uma determinada condição inicial $\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$. A expressão (1.2) é uma função

$$\Phi_h : \mathbf{y}_n \rightarrow \mathbf{y}_{n+1} \quad (1.3)$$

designada por fluxo numérico.

Exemplo 1

Como exemplo introdutório, considere-se o oscilador harmónico [6],

$$\frac{du}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = -u.$$

Em termos qualitativos, as soluções deste sistema:

- (i) são periódicas;
- (ii) são limitadas;
- (iii) conservam a quantidade $u^2 + v^2$.

Aplicando o método de Euler explícito, com passo temporal h , obtém-se:

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= U_n + hf(U_n) \\ &= U_n + hV_n \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} V_{n+1} &= V_n + hf(V_n) \\ &= V_n - hU_n, \end{aligned}$$

onde U_n e V_n representam a solução numérica. Tal significa que

$$U_{n+1}^2 + V_{n+1}^2 = (1 + h^2)(U_n^2 + V_n^2),$$

ou seja, o método numérico perdeu as três características qualitativas citadas. Ora, o desejável seria que o integrador produzisse soluções numéricas periódicas, limitadas e que preservasse a quantidade $u^2 + v^2$; nesse sentido, seria um integrador geométrico.

Aplicando o método de Euler implícito, obtém-se:

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= U_n + hf(U_{n+1}) \\ &= U_n + hV_{n+1} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} V_{n+1} &= V_n + hf(V_{n+1}) \\ &= V_n - hU_{n+1}. \end{aligned}$$

Como $U_n = U_{n+1} - hV_{n+1}$ e $V_n = V_{n+1} + hU_{n+1}$, resulta

$$U_{n+1}^2 + V_{n+1}^2 = \frac{U_n^2 + V_n^2}{1 + h^2},$$

ou seja, o sistema torna-se dissipativo e as soluções deixam de ser periódicas.

No entanto, aplicando a regra do ponto médio implícita

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= U_n + hf\left(\frac{U_n + U_{n+1}}{2}\right) \\ &= U_n + \frac{h}{2}(V_n + V_{n+1}) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} V_{n+1} &= V_n + hf\left(\frac{V_n + V_{n+1}}{2}\right) \\ &= U_n - \frac{h}{2}(U_n + U_{n+1}), \end{aligned}$$

obtém-se $U_{n+1}^2 + V_{n+1}^2 = U_n^2 + V_n^2$, adicionando membro a membro o quadrado das igualdades

$$U_{n+1} - \frac{h}{2}V_{n+1} = U_n + \frac{h}{2}V_n \quad \text{e} \quad V_{n+1} + \frac{h}{2}U_{n+1} = V_n - \frac{h}{2}U_n.$$

Note-se que agora o integrador numérico preserva as características das equações diferenciais a integrar.

Exemplo 2

Um outro exemplo clássico é o do pêndulo, com massa unitária e um fio de massa desprezível com comprimento unitário [13, 30]. Este sistema de um grau de liberdade, com Hamiltoniana

$$H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 - \cos q,$$

onde q representa a coordenada da posição, e p a quantidade de movimento, tem as seguintes equações de movimento

$$\dot{p} = -\sin q, \quad \dot{q} = p. \quad (1.4)$$

Como o campo vectorial é periódico, de período 2π em q , considera-se q como uma variável no círculo S^1 , ou seja, o espaço de fases dos pontos (p, q) é o cilindro $\mathbb{R} \times S^1$. É imediato verificar que ao longo das curvas-solução, a Hamiltoniana é um invariante, isto é,

$$H(p(t), q(t)) = \text{Const},$$

o que significa que as curvas-solução do problema estão nessas curvas de nível. Quando se recorre ao método de Euler explícito ou ao implícito, as soluções numéricas obtidas são espirais, mas quando se usa o método de Euler simpléctico ou a regra do ponto médio implícita, já se observa um comportamento qualitativo correcto. Neste exemplo, um outro aspecto qualitativo a considerar é a preservação da área pelo fluxo hamiltoniano, já que em sistemas hamiltonianos o fluxo é simpléctico (para sistemas em \mathbb{R}^2 , a simplecticidade do fluxo é equivalente à preservação da área). O método de Euler explícito não preserva a área do fluxo, ao passo que o método de Euler simpléctico o faz. Por fim, note-se que o fluxo deste sistema tem uma simetria $(q, p) \mapsto (-q, -p)$ que aplica o campo vectorial em si próprio (rotação de 180°) e uma simetria reversível $(q, p) \mapsto (q, -p)$ que aplica o campo vectorial no seu simétrico. Pelo que já foi dito, é evidente que os métodos de Euler explícito e implícito não preservam, também, esta característica.

Exemplo 3

O problema de Kepler descreve o movimento de um ponto material num plano, que é atraído em direcção à origem com uma força inversamente proporcional ao quadrado da distância. A Hamiltoniana do sistema é [11, 12, 37, 41]

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T \mathbf{p} - \frac{1}{\|\mathbf{q}\|},$$

ou seja

$$H(p_1, p_2, q_1, q_2) = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}},$$

onde a primeira parcela da Hamiltoniana é a energia cinética e a segunda a energia potencial. As equações do movimento são

$$\dot{p}_i = -\frac{q_i}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}, \quad \dot{q}_i = p_i, \quad i = 1, 2.$$

A trajectória no plano é uma curva fechada, dada por uma elipse, ou seja, a solução é periódica. Devido ao carácter central da força, além da conservação da energia, verifica-se que a quantidade de movimento angular é invariante e igual a

$$I(p_1, p_2, q_1, q_2) = q_1 p_2 - q_2 p_1.$$

O comportamento da energia decorrente da aplicação do método de Euler explícito, do método Runge-Kutta de ordem 4 e do método Störmer-Verlet, para as condições iniciais $\mathbf{q} = (1, 0)^T$ e $\mathbf{p} = (0, 1)^T$, com passo $h = 10^{-3}$, é diverso. A energia, embora não seja exactamente conservada pelo método Störmer-Verlet, oscila dentro de certos limites, mesmo no longo prazo; no entanto, com o Euler explícito, diverge sem limite, afastando-se cada vez mais do valor da Hamiltoniana, ao passo que com o clássico Runge-Kutta de ordem 4, a energia oscila dentro de limites muito mais alargados do que com o método Störmer-Verlet (ver figura 1.1). Mesmo as ordens de grandeza do erro na energia são substancialmente diferentes: enquanto no método de Euler explícito e no método Runge-Kutta ronda os 10^{-4} , no método Störmer-Verlet desce para os 10^{-15} .

Relativamente à quantidade de movimento angular, o método Störmer-Verlet conserva-a exactamente, ao passo que o método Euler explícito e o método Runge-Kutta não, conforme ilustrado na figura 1.2.

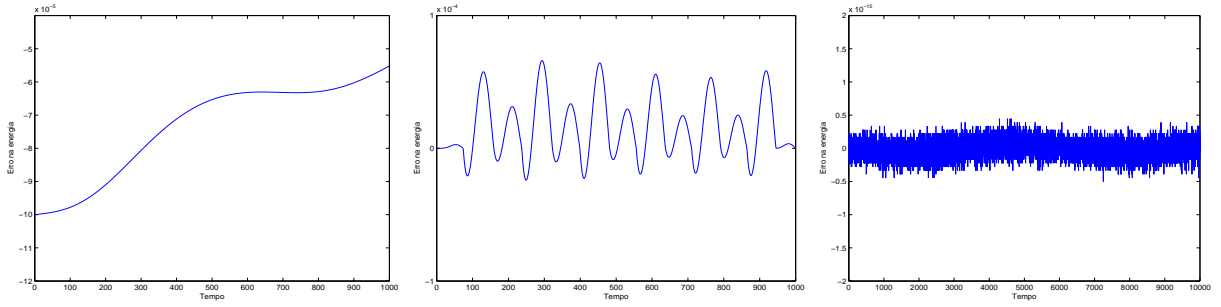


Figura 1.1: Erro na energia no problema de Kepler com o método de Euler explícito, com o método Runge-Kutta de ordem 4 e com o método Störmer-Verlet, respectivamente; as condições iniciais são $\mathbf{q} = (1, 0)^T$ e $\mathbf{p} = (0, 1)^T$, com passo $h = 10^{-3}$

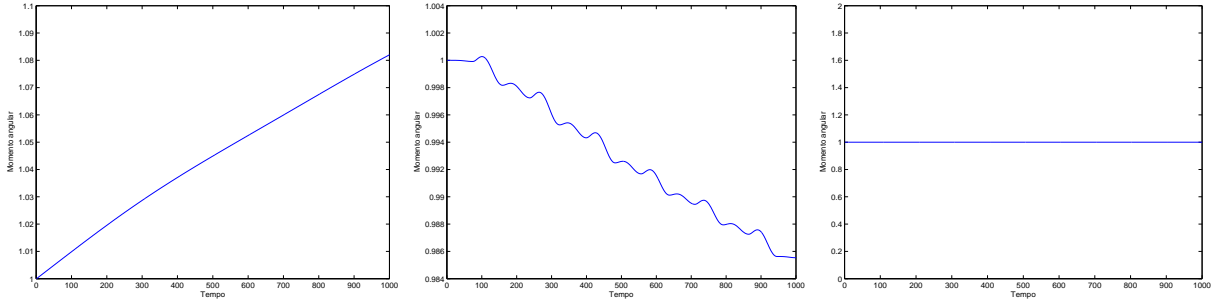


Figura 1.2: Erro no momento angular no problema de Kepler com o método de Euler explícito, com o método Runge-Kutta de ordem 4 e com o método Störmer-Verlet, respectivamente; as condições iniciais são $\mathbf{q} = (1, 0)^T$ e $\mathbf{p} = (0, 1)^T$, com passo $h = 10^{-3}$

Exemplo 4

Considere-se, agora, o problema

$$\begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{v-2}{v} \\ \frac{1-u}{u} \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

Um invariante do sistema é dado por

$$I(u, v) = \ln u - u + 2 \ln v - v,$$

já que

$$\frac{d}{dt} I(u(t), v(t)) = \frac{1-u}{u} \dot{u} - \frac{v-2}{v} \dot{v} = 0.$$

Tal significa que cada solução está numa curva de nível de $I(u, v)$ e, como todas as curvas de nível são fechadas, todas as soluções são periódicas. Para integrar este problema, implementaram-se três métodos: os métodos de Euler explícito, implícito e simplético, com condição inicial $(u, v) = (2, 2)$ e com um passo temporal $h = 0.1$. O comportamento das soluções numéricas observado foi o seguinte (ver figura 1.3): os métodos de Euler explícito e implícito produzem uma

espiral, comportamento qualitativamente incorrecto, já que a solução é periódica; já o método de Euler simplético produz uma solução numérica que, em termos qualitativos, é a correcta.

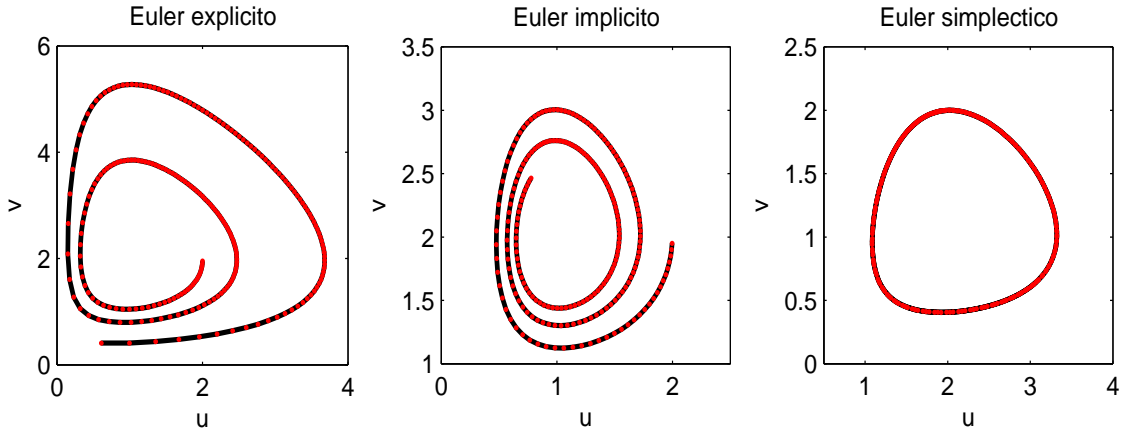


Figura 1.3: Solução das equações (1.5) para os métodos de Euler explícito, implícito e simplético, com condição inicial $(u, v) = (2, 2)$ e $h = 0.1$

1.3 Quais as características qualitativas a preservar?

Nesta secção resumiam-se as características globais e qualitativas do sistema descrito pela equação diferencial que se pretendem preservar quando se opta pela utilização de integradores geométricos. É, naturalmente, impossível elaborar uma lista exaustiva, mas a lista parcial que se segue cobre uma vasta variedade de possibilidades [6, 23, 32].

1. *Estrutura geométrica.* Propriedades do espaço de fase no qual o sistema é definido fornecem informação sobre as propriedades das soluções (em particular, nos sistemas hamiltonianos). Por exemplo, as soluções de sistemas dinâmicos hamiltonianos não podem ser espirais, facto associado à conservação da estrutura simplética pelo fluxo hamiltoniano.
2. *Leis de conservação.* Neste item incluem-se leis de conservação de quantidades tais como a massa, a energia e a quantidade de movimento, ou então, quantidades que são conservadas ao longo de trajectórias de partículas e fluxos, tais como a densidade do fluido ou a vorticidade potencial. Em problemas hamiltonianos, tem-se também a conservação da estrutura simplética no espaço de fase e a preservação do volume em sistemas com divergência nula (uma equação diferencial ordinária $\dot{x} = f(x)$ tem divergência nula se $\sum_{i=1}^n \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_i} = 0$).
3. *Simetrias.* As simetrias podem ser:
 - *Simetrias galileanas.* Incluem translações, reflexões e rotações. Por exemplo, no estudo do movimento de um corpo rígido no espaço tridimensional é determinante

o facto de tais sistemas serem invariantes sob simetrias galileanas. As simetrias galileanas reduzem a complexidade do retrato da fase e, por isso, devem ser preservadas.

- *Simetrias reversíveis.* Muitos sistemas físicos são invariantes sob simetrias ρ que satisfazem a identidade $\rho^2 = Id$; por exemplo, o sistema solar é invariante sob uma simetria temporal. Um outro exemplo clássico é o dos sistemas hamiltonianos, que são uma função par da quantidade de movimento \mathbf{p} , ou seja, a Hamiltoniana $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ é invariante sob a reflexão simétrica $\mathbf{p} \mapsto -\mathbf{p}$; então, se $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ é uma solução, também $(\mathbf{q}(-t), -\mathbf{p}(-t))$ o é. Consequentemente, é desejável que, nestes casos, também os integradores numéricos exibam uma simetria reversível.

Um método numérico $y_1 = \Phi_h(y_0)$ é simétrico se, fazendo a troca $y_0 \leftrightarrow y_1$ e $h \leftrightarrow -h$, o método continua inalterado. Pode definir-se a simetria de um método recorrendo ao método adjunto. O método $\Phi_h^* = (\Phi_{-h})^{-1}$ designa-se por método adjunto de Φ_h ; então, se $\Phi_h = \Phi_h^*$, o método diz-se simétrico, já que $\Phi_{-h} = \Phi_h^{-1}$. O algoritmo Störmer-Verlet e a regra do ponto médio implícita são algoritmos simétricos, mas o algoritmo de Euler explícito não o é.

Conhecendo um método numérico Φ_h e o seu adjunto Φ_h^* , é possível construir um método simétrico $\hat{\Phi}_h$, pela composição $\hat{\Phi}_h = \Phi_{\frac{h}{2}}^* \circ \Phi_{\frac{h}{2}}$ [13, 23].

As simetrias reversíveis devem ser preservadas já que, assim como as simetrias galileanas, reduzem a complexidade do retrato da fase.

- *Simetrias em termos de escala.* Muitos problemas físicos gozam da propriedade de serem invariantes após mudanças de escala, quer no tempo, quer no espaço. Em parte, isto é o reflexo do facto das leis da física não dependerem das unidades usadas; por exemplo, as leis de gravitação de Newton são invariantes sob transformações de escala temporal ou espacial.

Considere-se o sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}), \quad \mathbf{u} = (u_1, \dots, u_N)^T, \quad \mathbf{f} = (f_1, \dots, f_N)^T.$$

Este sistema é invariante sob a acção da transformação

$$t \rightarrow t + \lambda, \quad \forall \lambda.$$

Um reescalamento das variáveis dependente e independente pode ser descrito por $\alpha = (\alpha_0, \dots, \alpha_N)$, tal que

$$t \rightarrow \lambda^{\alpha_0} t, \quad u_i \rightarrow \lambda^{\alpha_i} u_i, \quad \forall \lambda > 0.$$

Um exemplo típico é a mudança de unidades de medida; se u representar a velocidade e t o tempo, a mudança de escala $t \rightarrow \lambda t$ induz $u \rightarrow \frac{u}{\lambda}$. Naturalmente, um problema físico não deve depender das unidades de medida: o que conduz ao conceito de invariância em termos de escala de um sistema de equações. A equação diferencial $\frac{du}{dt} = u^2$ e a equação diferencial $\frac{d^2r}{dt^2} = -\frac{1}{r^2}$, que traduz o movimento, numa dimensão, de uma partícula num campo gravitacional, são exemplos de equações diferenciais invariantes sob transformações de escala [5]. Um método numérico invariante sob transformações da escala temporal e espacial deve exibir uma relação similar, em termos discretos.

- *Simetrias do grupo de Lie.* Envolve a invariância do sistema a um grupo de transformações, chamado grupo de Lie. Um exemplo natural em mecânica é a invariância do sistema sob a acção do grupo $SO(3)$.
4. *Comportamentos assintóticos.* Quando se pretende estudar a dinâmica de um sistema, para o fazer numericamente será necessário aplicar um método durante um número indefinido de passos, com vista a ganhar percepção sobre o comportamento do sistema no longo prazo. Note-se que em certos contextos, nomeadamente em dinâmica molecular, onde se trabalha com escalas temporais diversas, o estudo no longo prazo (medido em termos da escala temporal menor) é inevitável. Ora, o que ocorre com muitos métodos convencionais é que eles acumulam erros de forma exponencial à medida que o tempo avança; desta forma, o estudo de determinado fenómeno físico no longo prazo não é possível, mesmo para métodos de ordem significativa e com um erro local muito pequeno. É, então, essencial o uso de métodos para os quais se tenha algum controlo sobre o crescimento do erro, mesmo que o erro local desses métodos possa parecer grande quando comparado com outros métodos. Em suma, espera-se que os integradores tenham um desempenho no longo prazo que permita reproduzir o comportamento assintótico de um determinado sistema dinâmico.
 5. *Ordem das soluções.* A equação diferencial pode ter algum princípio que leve à preservação da ordem das soluções. Por exemplo, dados dois conjuntos iniciais de dados $u_0(x)$ e $v_0(x)$ para uma equação diferencial parcial, as soluções podem respeitar a ordem seguinte: se $u_0(x) < v_0(x)$ para todo o x , então $u(x, t) < v(x, t)$ para todo o x e t . A equação do calor $u_t = u_{xx}$, assim como muitas outras equações parabólicas, tem esta propriedade. Será, então, razoável esperar que o integrador numérico obedeça ao mesmo princípio de preservação da ordem das soluções.
 6. *Comportamento dinâmico dos integradores.* Os integradores devem preservar, o mais possível, o retrato da fase.
 - *Preservação dos pontos de equilíbrio.* Todos os métodos B-séries retêm os pontos de equilíbrio de $\dot{x} = f(x)$ exactamente. Por exemplo, os métodos Runge-Kutta podem

ser expandidos em séries de Taylor da forma

$$x_{k+1} = a_0 x_k + a_1 h f + a_2 h^2 f'(f) + h^3 (a_3 f''(f, f) + a_4 f'(f'(f))) + \dots \quad (1.6)$$

onde cada termo é avaliado em $x = x_k$ e a derivada $f^{(m)}$ é uma função multilinear de m campos vectoriais num único campo vectorial. Os termos da série chamam-se diferenciais elementares de f e a série designa-se por B-série. Um método de integração que tenha uma expansão semelhante a (1.6) diz-se um método B-série. No entanto, alguns métodos B-série podem gerar pontos fixos adicionais, chamados de espúrios. Os métodos Runge-Kutta gaussianos de ordem 4 não produzem pontos fixos espúrios.

- *Propriedades do espectro e bifurcações.* Um aspecto crucial da dinâmica próxima de um ponto de equilíbrio são os seus valores próprios lineares. Uma segunda razão que justifica a importância dos valores próprios está associada às bifurcações - tipicamente, elas ocorrem quando a parte real de um dos valores próprios é nula. Por estas razões, é importante preservar as propriedades espectrais dos pontos de equilíbrio. Os métodos Runge-Kutta simétricos e A-estáveis, tal como os Runge-Kutta gaussianos, preservam estas propriedades para qualquer passo temporal h . Os métodos não geométricos, tipicamente, não preservam, neste sentido, o retrato da fase.

Mas quais as características de sistemas hamiltonianos? Os capítulos que se seguem são um resumo alargado da teoria subjacente à dinâmica hamiltoniana e lagrangiana. Tal base teórica será necessária para concluir sobre a natureza geométrica dos integradores. Afinal, se um integrador é geométrico se preservar alguma(s) característica(s) qualitativa(s) do sistema de equações diferenciais, pressupõe-se que se conhecem essas características.

Capítulo 2

Sistemas hamiltonianos e lagrangianos

Os sistemas mecânicos resultantes dos princípios físicos são hamiltonianos ou conservativos. Mesmo sistemas dissipativos, tipicamente, mantêm certas leis de conservação (por exemplo, a conservação da massa em dinâmica de fluídos); e, se a dissipação for fraca, tal como a dissipação de Rayleigh, os sistemas são considerados primariamente conservativos, podendo ser integrados em duas partes - a parte dominante, a conservativa, e a parte dissipativa. Tal significa que os sistemas hamiltonianos são frequentes e relevantes numa grande variedade de problemas físicos, em áreas tão diversas como a mecânica, a astronomia, a dinâmica molecular e a óptica e, por isso, foi com naturalidade que a primeira área onde as ideias geométricas foram usadas foi a integração de equações diferenciais ordinárias em problemas hamiltonianos. O ponto de vista hamiltoniano permite estudar com profundidade uma série de problemas da mecânica que não admitem outros meios de solução - por exemplo, o problema da atracção por dois centros imóveis e o problema das geodésicas no elipsóide de três eixos [1]. A perspectiva hamiltoniana assume, ainda, maior importância para os métodos aproximados da teoria das perturbações (na mecânica celeste), para a compreensão do carácter geral do movimento em sistemas mecânicos complexos (teoria ergódica, mecânica estatística) e em relação a outras áreas, tal como a mecânica quântica. O ponto de vista lagrangiano permite estudar até ao fim uma série de problemas importantes na mecânica, nomeadamente, problemas na teoria das pequenas oscilações e na dinâmica do sólido. É possível fazer a ponte entre as duas perspectivas, sendo que, em muitos casos, elas são equivalentes [1]. No formalismo lagrangiano obtêm-se, para a evolução do sistema, equações diferenciais ordinárias de segunda ordem, ao passo que no formalismo hamiltoniano se obtêm equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Neste sentido, o formalismo hamiltoniano é mais apto para aplicar à teoria dos sistemas dinâmicos.

2.1 As equações de Euler-Lagrange e as equações de Hamilton

Seja Q o espaço das configurações, com coordenadas $q^i, i = 1, \dots, d$, o qual descreve a configuração do sistema, onde d representa o número de graus de liberdade. O número de quantidades independentes que devem ser especificadas em ordem a definir a posição de um qualquer sistema é designado por número de graus de liberdade.

Quando todas as posições das partículas e respectivas velocidades estão simultaneamente especificadas, a experiência mostra que o estado do sistema está completamente determinado e que o seu movimento subsequente pode ser, em princípio, calculado. Matematicamente, tal significa que se todas as posições q e velocidades \dot{q} são dadas em algum instante, as acelerações \ddot{q} , naquele instante, são univocamente definidas [22]. As relações entre as acelerações, velocidades e posições são chamadas de equações do movimento.

A Lagrangiana $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ é, em geral, igual à diferença entre a energia cinética T e a energia potencial V do sistema, admitindo-se que $\dot{q}^i = dq^i/dt$ representa a velocidade generalizada. A Lagrangiana contém somente q e \dot{q} , e não derivadas de ordem superior, já que o estado do sistema é completamente definido quando as posições e as respectivas velocidades são dadas. L é uma função $L : TQ \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, onde TQ , designado por fibrado tangente de Q , tem coordenadas $(q^1, \dots, q^n, \dot{q}^1, \dots, \dot{q}^n)$.

Segundo o princípio variacional de Hamilton, as trajectórias do sistema no intervalo de tempo $[a, b]$ satisfazem

$$\delta S = \delta \int_a^b L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt = 0, \quad (2.1)$$

sendo $S = \int_a^b L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt$ designada por acção. O significado do princípio de Hamilton é o seguinte: escolha-se curvas $q^i(t)$ que unam dois pontos fixos em Q , num dado intervalo de tempo fixo $[a, b]$, e calcule-se o integral (2.1), admitindo que ele é uma função da curva; o princípio de Hamilton sustenta que esta função tem um ponto crítico ou estacionário numa solução no espaço de curvas. Seja δq^i a variação, isto é, a derivada de uma família de curvas com respeito a um parâmetro; então, pela regra da cadeia, a equação (2.1) é equivalente a

$$\sum_{i=1}^n \int_a^b \left(\frac{\partial L}{\partial q^i} \delta q^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta \dot{q}^i \right) dt = 0 \quad (2.2)$$

para todas as variações δq^i que se anulam nos extremos. Usando a igualdade

$$\delta \dot{q}^i = \frac{d}{dt} \delta q^i,$$

integrando por partes o segundo termo de (2.2) e atendendo ao facto de que $\delta q^i(a) = \delta q^i(b) = 0$, obtém-se

$$\sum_{i=1}^n \int_a^b \left[\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) \right] \delta q^i dt = 0. \quad (2.3)$$

Como δq^i é arbitrário, (2.2) é equivalente às equações de Euler-Lagrange,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} = 0, \quad (2.4)$$

sistema de d equações de segunda ordem, cuja solução depende de $2d$ constantes arbitrárias que descrevem o movimento, dadas as condições iniciais.

No caso do pêndulo (1.4), usando o ângulo α como coordenada, a energia cinética é dada por $T = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{ml^2\dot{\alpha}^2}{2}$ e a energia potencial por $V = mgy = -mgl \cos \alpha$. As equações de Euler-Lagrange são $-mgl \sin \alpha - ml^2\ddot{\alpha} = 0$.

Um outro exemplo é o da segunda lei de Newton, $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, que descreve o movimento de partículas num campo potencial V . Para isso, considere-se um sistema de N partículas que se movem num espaço euclidiano tridimensional; então, o espaço das configurações é $Q = \mathbb{R}^{3N}$ e $L = T - V$ é dado por

$$L(\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i, t) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N m_j \|\dot{\mathbf{q}}_j\|^2 - V(\mathbf{q}_i),$$

onde os pontos de Q são escritos como $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N$, e $\mathbf{q}_i \in \mathbb{R}^3$. Neste caso as equações de Euler-Lagrange (2.4) reduzem-se à segunda lei de Newton

$$\frac{d}{dt}(m_i \dot{\mathbf{q}}_i) = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_i}, \quad i = 1, \dots, N,$$

ou seja, $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, verificando-se que o sistema potencial newtoniano é um caso particular da mecânica lagrangiana.

Como se faz a passagem ao formalismo hamiltoniano? Introduzam-se as coordenadas

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}, \quad (2.5)$$

que representam os momentos conjugados generalizados do sistema. Defina-se a mudança de variáveis $(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \mapsto (\mathbf{q}, \mathbf{p})$, chamada transformação de Legendre $T_L : TQ \rightarrow T^*Q$ que, no caso dimensional finito tem coordenadas locais dadas por

$$T_L(q^i, \dot{q}^i) = \left(q^i, \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) = (q^i, p_i).$$

A Hamiltoniana $H : T^*Q \rightarrow \mathbb{R}$ é definida como

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T \dot{\mathbf{q}} - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}), \quad (2.6)$$

obtendo-se um sistema de $2d$ -equações de primeira ordem, chamadas equações de Hamilton

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}, \\ \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

ou então, em componentes do campo vectorial hamiltoniano X_H

$$\begin{aligned} X_{p_i}(q, p) &= -\frac{\partial H}{\partial q^i}(q, p), \\ X_{q^i}(q, p) &= \frac{\partial H}{\partial p_i}(q, p). \end{aligned}$$

O grau de suavidade da Hamiltoniana H pode variar de problema para problema, mas admite-se que, no mínimo, H é de classe C^2 , de forma a permitir que o lado direito do sistema (2.7) seja de classe C^1 , e então, os teoremas da existência e unicidade sejam aplicáveis.

Por vezes, é útil combinar todas as variáveis dependentes em (2.7) num vector $2d$ -dimensional $\mathbf{y} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$. Neste caso, (2.7) assume a forma

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = J^{-1} \nabla H, \quad (2.8)$$

onde $H = H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ é a função Hamiltoniana, ∇ é o operador

$$\left(\frac{\partial}{\partial p_1}, \frac{\partial}{\partial p_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial p_d}, \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial q_d} \right),$$

J é a matriz anti-simétrica de dimensão $2d \times 2d$

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I_d \\ -I_d & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

e I_d representa a matriz identidade de dimensão d .

O formalismo hamiltoniano desenvolve-se no espaço de fase T^*Q , designado por fibrado cotangente de Q , com coordenadas $(q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n)$, contravariantes as coordenadas de q e covariantes as de p .

Para a Lagrangiana $L : \mathbb{R}^{6N} = \{(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) : \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}} \in \mathbb{R}^{3N}\} \rightarrow \mathbb{R}$ de N partículas,

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \|\dot{\mathbf{q}}_i\|^2 - V(\mathbf{q}),$$

vem

$$\begin{aligned} H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \mathbf{p}^T \dot{\mathbf{q}} - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \|\dot{\mathbf{q}}^i\|^2 + V(\mathbf{q}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \|\mathbf{p}_i\|^2 + V(\mathbf{q}). \end{aligned} \tag{2.10}$$

Um exemplo simples da passagem do sistema lagrangiano ao hamiltoniano é dado pelo oscilador harmónico, com Lagrangiana $L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{k}{2} x^2$. O momento conjugado é $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$. A Hamiltoniana H é

$$\begin{aligned} H &= p\dot{x} - L \\ &= m\dot{x}^2 - \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{k}{2} x^2 \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} x^2, \end{aligned}$$

o que já seria de esperar, uma vez que neste caso a Hamiltoniana coincide com a energia total. As equações de Hamilton são então

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx.$$

Diferenciando a primeira equação em ordem ao tempo e eliminando \dot{p} , obtém-se a equação $m\ddot{x} + kx = 0$, conforme esperado. A solução geral para x é uma oscilação

$$x(t) = C_1 \sin \varpi t + C_2 \cos \varpi t, \quad \varpi = \sqrt{(k/m)},$$

onde ϖ representa a frequência angular e C_1 e C_2 são constantes de integração; analogamente,

$$p(t) = m\varpi(C_1 \cos \varpi t - C_2 \sin \varpi t).$$

No plano de fases, o plano (p, q) , as curvas paramétricas $p(t), q(t)$ correspondem às elipses

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2} = \text{const},$$

e, no caso de $mk = 1$, correspondem a circunferências.

As equações de Hamilton podem ser reescritas com recurso aos colchetes de Poisson, sob a forma

$$\{\dot{F}\} = \{F, H\} \quad (2.11)$$

para todas as funções $F \in \mathcal{F}(P)$, onde $\mathcal{F}(P)$ representa o espaço das funções suaves no espaço de fases $P = \mathbb{R}^{6N}$ [38]. Os colchetes de Poisson são definidos como

$$\{G, K\} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial G}{\partial \mathbf{q}^i} \frac{\partial K}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}_i} \frac{\partial K}{\partial \mathbf{q}^i} \right), \quad (2.12)$$

para todas as funções $G, K \in \mathcal{F}(P)$. Usando as equações (2.7) e (2.12), para qualquer $F \in \mathcal{F}(P)$, obtém-se

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial F}{\partial \mathbf{q}^i} \dot{\mathbf{q}}^i + \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}_i} \dot{\mathbf{p}}_i \right) &= \frac{dF}{dt} \\ &= \{F, H\} \\ &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial F}{\partial \mathbf{q}^i} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}^i} \right), \end{aligned} \quad (2.13)$$

a qual é equivalente às equações (2.7), já que $F \in \mathcal{F}(P)$ é arbitrária.

Demonstra-se que as equações de Euler-Lagrange são equivalentes às equações de Hamilton. Os princípios variacionais também existem no formalismo hamiltoniano [1, 13, 28]. Para derivar as equações de Euler-Lagrange, consideram-se curvas q no espaço das configurações, ao passo que no caso das equações de Hamilton consideram-se curvas no espaço (q, p) , o espaço de fase. O princípio de Hamilton no espaço de fase é traduzido no teorema seguinte.

Teorema 2.1. *Considere-se uma Hamiltoniana H num dado fibrado cotangente T^*Q . Uma curva $(q^i(t), p_i(t))$ em T^*Q satisfaz as equações de Hamilton se e só se*

$$\delta \int_a^b [p_i \dot{q}^i - H(q^i, p_i)] dt = 0, \quad (2.14)$$

para todas as variações das curvas $(q^i(t), p_i(t))$ no espaço de fases, onde $\dot{q}^i = \frac{dq^i}{dt}$, sendo q^i fixo nos pontos extremos.

Note-se que

$$\delta \int_a^b [p_i \dot{q}^i - H(q^i, p_i)] dt = \int_a^b \left[(\delta p_i) \dot{q}^i + p_i (\delta \dot{q}^i) - \frac{\partial H}{\partial q^i} \delta q^i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i \right] dt.$$

Como $q^i(t)$ é fixa nos dois pontos extremos, resulta $p_i \delta q^i = 0$ nesses pontos e, então, o segundo termo da equação anterior pode ser integrado por partes, obtendo-se

$$\int_a^b \left[\dot{q}^i (\delta p_i) - \dot{p}_i (\delta q^i) - \frac{\partial H}{\partial q^i} \delta q^i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i \right] dt,$$

o qual se anula para todas as $\delta p_i, \delta q^i$, satisfazendo as equações de Hamilton (2.7).

2.2 Leis de conservação

Durante o movimento, as posições e as velocidades que especificam o estado do sistema variam com o tempo. Existem, no entanto, funções dessas quantidades cujos valores permanecem constantes durante o movimento, e dependem somente das condições iniciais. Tais funções são chamadas de integrais do movimento ou invariantes do movimento.

Nem todos os integrais do movimento têm a mesma importância na Mecânica. Existem alguns cuja constância tem um profundo significado, derivado da homogeneidade e isotropia do espaço e do tempo. A conservação da energia é resultado da homogeneidade do tempo, e a conservação dos clássicos momentos linear e angular são consequência da homogeneidade do espaço e da isotropia do espaço, respectivamente [22].

Em virtude do facto do tempo ser homogêneo, a Lagrangiana e a Hamiltoniana de um sistema fechado não depende explicitamente do tempo. Devido ao espaço ser homogêneo, as propriedades mecânicas de um sistema fechado permanecem inalteradas por um qualquer deslocamento paralelo do inteiro sistema no espaço. A conservação do momento angular decorre da isotropia do espaço, ou seja, as propriedades mecânicas de um sistema fechado não variam quando o sistema roda como um todo no espaço.

2.2.1 Lei de conservação da energia

Os sistemas hamiltonianos que não dependem explicitamente do tempo têm natureza conservativa, no sentido da conservação da energia do sistema. No caso de T ser quadrática, verifica-se a igualdade [1, 13, 28]

$$H = T + V,$$

ou seja, a Hamiltoniana representa a energia total do sistema, sendo um integral primeiro do sistema. Este resultado é evidente nas equações (2.10), onde a Hamiltoniana coincide com a energia total do sistema, expressa nas variáveis (\mathbf{q}, \mathbf{p}) .

O mesmo resultado é obtido pelo uso dos colchetes de Poisson; por um lado, note-se que se verifica $\{F, G\} = -\{G, F\}$ e, em particular, $\{H, H\} = 0$, e por outro lado, usando a equação

(2.12), obtém-se

$$\dot{H} = 0,$$

ou seja, a energia é conservada. Tem-se o resultado seguinte [1, 22].

Teorema 2.2. *A igualdade $\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}$ é verdadeira e, em especial, no caso de sistemas em que a função de Hamilton não depende explicitamente do tempo, ou seja, $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, cumpre-se a lei da conservação da função de Hamilton*

$$H(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)) = \text{const.}$$

As simetrias têm um papel relevante nos problemas de mecânica. Qualquer simetria do problema que permita adoptar um sistema de coordenadas \mathbf{q} , de modo a fazer com que a função de Hamilton não dependa de algumas coordenadas, permite determinar certos invariantes e reduzir o problema a um outro com um número menor de coordenadas. Por exemplo, quando a coordenada q^1 não figura na função de Hamilton, de forma que $\frac{\partial H}{\partial q^1} = 0$, essa coordenada diz-se cíclica; naturalmente, que se uma coordenada é considerada cíclica no contexto hamiltoniano, também o será no contexto lagrangiano. Neste contexto, o teorema seguinte é muito utilizado para resolver problemas na mecânica [1].

Teorema 2.3. *Seja q^1 uma coordenada cíclica. Neste caso, p_1 é um invariante. Sendo assim, a variação das restantes coordenadas com o decorrer do tempo é a mesma que tem lugar no sistema $n - 1$ -dimensional, com coordenadas independentes q^2, \dots, q^n que tem a função de Hamilton*

$$H(p_2, \dots, p_n, q^2, \dots, q^n, t, c)$$

dependente do parâmetro $c = p_1$.

2.2.2 Teorema de Noether

Um dos pilares da mecânica lagrangiana é o teorema de Noether que, em linguagem informal assume a seguinte forma: a todo o grupo uniparamétrico de difeomorfismos da variedade configuracional do sistema lagrangiano que conserva a função de Lagrange corresponde um invariante das equações do movimento. Dito de outra forma, quando existe uma simetria na Lagrangiana ou na Hamiltoniana, então certas quantidades do movimento, as funções quantidade de movimento, irão ser preservadas pelo fluxo lagrangiano ou hamiltoniano, respectivamente.

Uma dedução possível do teorema de Noether é a que se encontra em [16]. Seja s o parâmetro que caracteriza uma transformação geral de coordenadas; se $s = 0$, as coordenadas não são transformadas. Por exemplo, considere-se uma Lagrangiana que contém uma força central arbitrária;

então, o sistema de coordenadas pode rodar livremente sem alterar a Lagrangiana (admitte-se que a rotação é independente do tempo). Para qualquer valor de θ , o ponto (x, y) é transformado num ponto (x', y') , de acordo com

$$x' = x \cos \theta - y \sin \theta,$$

$$y' = y \cos \theta + x \sin \theta.$$

Se $\theta = 0$, está-se em presença da transformação identidade. Neste exemplo, tem-se que $s = \theta$. Voltando ao caso genérico, se $\mathbf{q}(t)$ for a solução das equações de Euler-Lagrange no sistema original, então $\mathbf{Q}(s, t)$ representa a solução das equações de Euler-Lagrange para qualquer valor de s , com $\mathbf{Q}(0, t) = \mathbf{q}(t)$. A definição da invariância da Lagrangiana é

$$L' \equiv L(\mathbf{Q}(s, t), \dot{\mathbf{Q}}(s, t), t) = L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t).$$

Se a Lagrangiana é invariante, então L' não depende de s (por simplicidade e sem perda de generalidade em relação ao que se pretende verificar, não se considera a dependência temporal):

$$\frac{d}{ds} L(\mathbf{Q}(s, t), \dot{\mathbf{Q}}(s, t)) = 0.$$

De acordo com a regra da cadeia, vem

$$\frac{dL}{ds} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{ds} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{Q}}} \frac{d\dot{\mathbf{Q}}}{ds},$$

e de acordo com as equações de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{Q}} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{Q}}}.$$

Então,

$$\begin{aligned} \frac{dL}{ds} &= \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{Q}}} \frac{d\mathbf{Q}}{ds} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{Q}}} \frac{d\dot{\mathbf{Q}}}{ds} \\ &= \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{Q}}} \frac{d\mathbf{Q}}{ds} \right] \\ &= 0, \end{aligned}$$

o que significa que

$$I(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \equiv p \frac{d\mathbf{Q}}{ds} \Big|_{s=0} = \text{const}, \quad (2.15)$$

onde $\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}$ e $\frac{d\mathbf{Q}}{ds}$ são avaliados em $s = 0$ por uma questão de conveniência.

Admita-se, agora, que a transformação é descrita por mais do que um parâmetro; por exemplo, as rotações são descritas por três parâmetros. Faz-se $s_j = 1, 2, \dots$. Para cada parâmetro s_j , repete-se a derivação feita acima, mostrando que existe uma quantidade conservada I_j associada a ele. Para N graus de liberdade, vem:

$$I_j(q^1, q^2, \dots, q^N, \dot{q}^1, \dot{q}^2, \dots, \dot{q}^N) \equiv \sum_{k=1}^N p_k \left. \frac{dQ^k}{ds_j} \right|_{\text{todos } s=0} = \text{const}, \quad (2.16)$$

onde $p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^k}$. No caso das rotações espaciais, I_1, I_2 e I_3 são as componentes da quantidade de movimento angular total.

A expressão (2.16) traduz o teorema de Noether: se a Lagrangiana é invariante sob uma simetria contínua, existem quantidades conservadas associadas a essa simetria, uma para cada parâmetro da transformação. Tal pode ser determinado diferenciando cada coordenada em ordem aos parâmetros da transformação, na vizinhança da transformação identidade, multiplicando pela quantidade de movimento conjugada e somando ao longo dos graus de liberdade. O teorema de Noether é simplesmente um teorema extraordinário, estabelecido por uma das mais espantosas investigadoras da história científica humana, permitindo ligar duas noções muito importantes, quer na teoria, quer na prática, e irá ser retomado na secção sobre funções quantidade de movimento.

2.2.3 Simplecticidade

Outros integrais do movimento estão associados com a simplecticidade do fluxo hamiltoniano, com o teorema de Liouville e com o teorema de Poincaré sobre o retorno.

Os sistemas hamiltonianos preservam a simplecticidade do seu fluxo. O que é que isso significa? A solução do sistema (2.8) induz uma transformação ψ no espaço de fases \mathbb{R}^{2d} ; tal função diz-se simpléctica se, sendo ψ linear,

$$\psi^T J \psi = J, \quad (2.17)$$

onde a matriz J é dada pela expressão (2.9). A interpretação geométrica da simplecticidade do fluxo hamiltoniano é fornecida, por exemplo, em [1, 13]. Os objectos básicos a serem estudados são paralelogramos de duas dimensões em \mathbb{R}^{2d} . Admita-se que os paralelogramos podem ser gerados por dois vectores

$$\begin{pmatrix} \xi^p \\ \xi^q \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \eta^p \\ \eta^q \end{pmatrix},$$

onde $\xi^p, \xi^q, \eta^p, \eta^q \in \mathbb{R}^d$, no espaço (\mathbf{p}, \mathbf{q}) como

$$P = \{t\xi + s\eta : 0 \leq t \leq 1, 0 \leq s \leq 1\}.$$

No caso $d = 1$, considere-se a área orientada

$$\text{área.or}(P) = \det \begin{pmatrix} \xi^p & \eta^p \\ \xi^q & \eta^q \end{pmatrix} = \xi^p \eta^q - \xi^q \eta^p. \quad (2.18)$$

No caso $d > 1$, substitui-se (2.18) pela soma das áreas orientadas das projecções de P nos planos coordenados (p_i, q^i)

$$\omega(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \sum_{i=1}^d \det \begin{pmatrix} \xi_i^p & \eta_i^p \\ \xi_i^q & \eta_i^q \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^d (\xi_i^p \eta_i^q - \xi_i^q \eta_i^p), \quad (2.19)$$

que define uma função bilinear que actua nos vectores de \mathbb{R}^{2d} . Em notação matricial, esta função assume a forma

$$\omega(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \boldsymbol{\xi}^T J \boldsymbol{\eta}. \quad (2.20)$$

A definição de simplecticidade em (2.17) é equivalente a

$$\omega(A\boldsymbol{\xi}, A\boldsymbol{\eta}) = \omega(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}), \quad (2.21)$$

para todo o $\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{2d}$, sendo $A : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ uma função linear. Mostra-se que $\det A = 1$ [28]. No caso $d = 1$, a expressão $\omega(\xi, \eta)$ representa a área do paralelogramo P , e então a simplecticidade da função linear A equivale à preservação da área de P . No caso geral, onde $d > 1$, a simplecticidade significa que a soma das áreas orientadas das projecções de P sobre (p_i, q^i) é a mesma, no caso dos paralelogramos transformados $A(P)$.

No caso da função ψ não ser linear, uma função diferenciável $\psi : U \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$, onde $U \subset \mathbb{R}^{2d}$ é um aberto, diz-se simpléctica se a matriz jacobiana $\psi'(p, q)$ for simpléctica

$$\psi'(p, q)^T J \psi'(p, q) = J \quad \text{ou} \quad \omega(\psi'(p, q)\boldsymbol{\xi}, \psi'(p, q)\boldsymbol{\eta}) = \omega(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}). \quad (2.22)$$

A interpretação geométrica da simplecticidade de funções não lineares é a seguinte. Seja M uma subvariedade 2-dimensional do conjunto $2d$ -dimensional U , e admita-se que $M = \phi(K)$, onde $K \subset \mathbb{R}^2$ é um compacto, sendo $\phi(s, t)$ uma função continuamente diferenciável. A variedade M pode ser considerada como o limite das uniões dos paralelogramos gerados pelos vectores

$$\frac{\partial \phi}{\partial s}(s, t) ds \quad \text{e} \quad \frac{\partial \phi}{\partial t}(s, t) dt.$$

Para um paralelogramo, considere-se a soma das áreas orientadas das suas projecções sobre o plano (p_i, q^i) e faça-se a adição sobre todos os paralelogramos da variedade. No limite, obtém-se a expressão

$$\Omega(M) = \iint_K \omega \left(\frac{\partial \phi}{\partial s}(s, t), \frac{\partial \phi}{\partial t}(s, t) \right) ds dt. \quad (2.23)$$

Se uma função $\psi : U \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ é simpléctica em U , então ela preserva a expressão $\Omega(M)$, o que significa que

$$\Omega(\psi(M)) = \Omega(M)$$

para todas as variedades 2-dimensionais que podem ser representadas como a imagem de uma função ϕ continuamente diferenciável.

Para $d = 1$, $M \subset \mathbb{R}^2$ e escolhe-se $K = M$, sendo ϕ a função identidade. Neste caso, $\Omega(M) = \iint_M ds dt$ representa a área de M . Então, todas as funções simplécticas, mesmo as não lineares, preservam a área, facto que as torna muito importantes.

No caso de problemas com um grau de liberdade ($d = 1$), a simplécticidade do fluxo hamiltoniano traduz-se na preservação da área orientada. No caso do oscilador harmónico (2.1) o fluxo, com condições iniciais $(p(0), q(0))$ em $t = 0$ assume a forma matricial

$$\begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varpi t & -(m\varpi) \sin \varpi t \\ (m\varpi)^{-1} \sin \varpi t & \cos \varpi t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(0) \\ q(0) \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

No caso de $m\varpi = 1$, o fluxo traduz-se numa rotação rígida de ϖt radianos. No caso de $m\varpi \neq 1$, mostra-se que a matriz representativa do fluxo em (2.24) pode ser factorizada como [41]

$$\begin{pmatrix} m\varpi & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varpi t & -\sin \varpi t \\ \sin \varpi t & \cos \varpi t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (m\varpi)^{-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

A matriz mais à direita contrai a área de um factor $m\varpi$, o efeito exactamente oposto da matriz mais à esquerda, que actua após a rotação rígida.

Atendendo à sua importância, recorde-se que o conjunto das transformações simplécticas $\psi : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ é um grupo, já que se verificam cumulativamente as seguintes condições:

1. A composição de transformações simplécticas é fechada, ou seja, se ψ e φ são transformações simplécticas, então também o é a transformação $\psi \circ \varphi$.

$$(\psi' \varphi')^T J (\psi' \varphi') = \varphi'^T (\psi'^T J \psi') \varphi' = \varphi'^T J \varphi' = J.$$

2. A composição de transformações simplécticas é associativa.

3. Se ψ é simpléctica, então a sua inversa ψ^{-1} também o é.

Partindo da hipótese de que a transformação é simpléctica, usando uma definição alternativa, baseada na identidade $J^{-1} = -J$, tem-se

$$\psi'^T J^{-1} \psi' = J^{-1}$$

e atendendo a que, obviamente, $J^T = -J$, ou seja, $J^{-T} = -J^{-1}$, obtém-se

$$\psi'^T J \psi' = J \Rightarrow (\psi'^T J \psi')^{-T} = J^{-T} \Rightarrow \psi'^{-T} J^{-1} \psi'^{-1} = J^{-1} \Rightarrow (\psi^{-1})^T J^{-1} (\psi^{-1}) = J^{-1},$$

o que demonstra que ψ^{-1} é uma transformação simpléctica.

4. A transformação $\psi = \text{id}$ é simpléctica, o que é óbvio, já que é satisfeita a identidade $\text{id}^T J \text{id} = J$.

Um resultado de Poincaré, de 1899, mostra que o fluxo dos sistemas hamiltonianos é sempre simpléctico.

Teorema 2.4. *Seja $H(p, q)$ uma função C^2 em $U \subset \mathbb{R}^{2d}$. Então, para cada t , o fluxo, onde estiver definido, é uma transformação simpléctica.*

A demonstração deste teorema pode ser encontrada em [13]. Demonstra-se, também, a equivalência entre fluxos simplécticos e a sua natureza hamiltoniana. Uma equação diferencial diz-se localmente hamiltoniana se a igualdade (2.8) se verificar.

Teorema 2.5. *Seja $f : U \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ uma função continuamente diferenciável. Então, $\dot{y} = f(y)$ é localmente hamiltoniana se e só se o seu fluxo é simpléctico, para todo $y \in U$ e para todo t suficientemente pequeno.*

Mas, a teoria hamiltoniana permite ir um pouco mais além nestas considerações sobre a preservação da área, convicção que toma forma no teorema de Liouville, cuja demonstração pode ser encontrada em [1, 22].

Teorema 2.6 (Teorema de Liouville). *O fluxo de fase ψ conserva o volume, ou seja, para qualquer domínio D*

$$\text{volume}(\psi D) = \text{volume} D.$$

[1] demonstra uma afirmação um pouco mais geral, também devida a Liouville. Considere-se um sistema de equações diferenciais ordinárias $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, onde $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$, cuja solução se prolonga por todo o eixo do tempo. Seja g^t o respectivo grupo de transformações

$$g^t(\mathbf{x}) = \mathbf{x} + \mathbf{f}(\mathbf{x})t + O(t^2), \quad (t \rightarrow 0).$$

Seja $D(0)$ um domínio no espaço $\{\mathbf{x}\}$ e $v(0)$ o volume desse domínio, sendo válidas as igualdades

$$v(t) = \text{volume} D(t), \quad D(t) = g^t D(0).$$

Então, quando $\text{div} \mathbf{f} \equiv 0$, g^t conserva o volume: $v(t) = v(0)$.

O teorema de Liouville é apresentado noutra forma em [16]. Defina-se a densidade do espaço de

fase como

$$\rho \equiv \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\mathcal{N}(\Delta A)}{\Delta A},$$

onde \mathcal{N} representa o número de sistemas na «área do espaço de fase» $\Delta \equiv \Delta q \Delta p$, todos governados pela mesma Hamiltoniana. Mostra-se que

$$\frac{d\rho}{dt} = 0,$$

ou seja, a área de qualquer distribuição no espaço de fases é preservada. O volume do espaço de fases é conservado, isto é, a densidade do espaço de fases assemelha-se a um fluido incompressível. No seguimento do teorema de Liouville faz sentido enunciar o teorema de Poincaré, citado e demonstrado em [1].

Teorema 2.7 (Teorema de Poincaré sobre o retorno). *Seja ψ uma aplicação que conserva o volume, contínua, biunívoca e que transforma em si próprio o domínio limitado D do espaço euclideano: $\psi D = D$.*

Neste caso, em qualquer vizinhança U de qualquer ponto do domínio D , há um ponto $x \in U$ que retorna ao domínio U , ou seja, $\psi^n x \in U$, para certo $n > 0$.

Em linguagem mais simples, tal significa que quase todo o ponto em movimento retorna, reiteradas vezes, à sua posição inicial. Uma aplicação, com resultados que se poderiam designar por paradoxais, é a previsão: se a membrana que separa uma câmara cheia de gás de uma câmara onde há vácuo, for aberta, dentro de certo tempo, as moléculas de gás voltarão a reunir-se na câmara inicial. Para o senso comum, a solução tem natureza paradoxal, porque o «certo tempo» é maior que o tempo de existência do sistema solar.

Quando se considera $d = 1$, fluxo simpléctico significa preservação da área; [41] enfatiza que, para $d > 1$, a generalização correcta é a simplecticidade e não a preservação do volume. A simplecticidade caracteriza o fluxo hamiltoniano, ao passo que a conservação do volume é uma propriedade mais fraca, partilhada por alguns sistemas não hamiltonianos. Note-se de seguida, por exemplo, como a simplecticidade caracteriza e distingue os sistemas hamiltonianos dos sistemas genéricos.

A simplecticidade do fluxo hamiltoniano fornece mais informação do que, simplesmente, a preservação da área orientada - fornece informação sobre a dinâmica do sistema hamiltoniano. Devido à propriedade da conservação da área, características que são excepção em sistemas dinâmicos genéricos, são a regra em sistemas hamiltonianos; inversamente, características típicas de sistemas dinâmicos genéricos não se podem verificar nos sistemas hamiltonianos.

Considere-se um sistema autónomo (H não depende, explicitamente, do tempo) de equações

diferenciais no plano, da forma

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{f}(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{g}(\mathbf{p}, \mathbf{q}),$$

e assumamos que o ponto $(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}^0)$ é um ponto de equilíbrio. Regra geral, os pontos de equilíbrio são hiperbólicos: as partes reais dos dois valores próprios λ_1, λ_2 da linearização à volta do equilíbrio são não-nulas. Os pontos de equilíbrio hiperbólicos podem ser de três tipos:

- (i) atratores - λ_1, λ_2 têm parte real negativa;
- (ii) repulsores - λ_1, λ_2 têm parte real positiva;
- (iii) pontos sela - λ_1, λ_2 têm parte real de sinal contrário.

Regra geral, a situação de λ_1, λ_2 serem imaginários puros conjugados não se verifica: neste caso, pequenas perturbações arbitrárias no lado direito do sistema transformam-no num sistema com pontos de equilíbrio com natureza de atrator ou repulsor. No entanto, restringindo esta consideração a sistemas autónomos hamiltonianos no plano, o que é regra geral - pontos de equilíbrio hiperbólicos - não se pode verificar; atratores (ou repulsores) não têm lugar porque o fluxo, na sua vizinhança, contrai-se (expande-se). Um atrator para um fluxo ψ é um conjunto compacto A , com uma vizinhança U , tal que $\psi_t(U) \subset U$, $\forall t > 0$ e $A = \bigcap_{t>0} \psi_t(U)$. Mostra-se que, devido à symplecticidade do fluxo hamiltoniano, não existem atratores não triviais (o conjunto vazio e todo o espaço) [26]. Em suma, o caso de λ_1, λ_2 terem parte real nula é, agora, genérico: se um sistema hamiltoniano se enquadrar nesta situação (o ponto de equilíbrio é um centro), então, tipicamente, sistemas hamiltonianos vizinhos também o são.

Considerações análogas podem ser feitas a propósito das soluções periódicas. Em sistemas autónomos de equações diferenciais no plano, as órbitas periódicas são ciclos-limite estáveis ou instáveis. Na vizinhança de tais ciclos limite, a área contrai-se ou expande-se, o que significa que os ciclos limite não têm lugar em sistemas hamiltonianos. Para sistemas autónomos hamiltonianos no plano, uma órbita periódica está rodeada por outras órbitas periódicas, uma situação que não é genérica em sistemas autónomos não hamiltonianos.

[41] menciona que todas as propriedades específicas da dinâmica hamiltoniana podem ser derivadas da propriedade da preservação da área, ou seja, da symplecticidade do fluxo. Com efeito, a conservação pelo fluxo da área orientada é uma característica que só é verificável em sistemas hamiltonianos. Assumamos que Ω é simplesmente conexo e que

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t), \quad \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{g}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t), \quad (2.25)$$

é um sistema diferencial suave cujo fluxo é symplético. Então, (2.25) é, efectivamente, um sistema hamiltoniano, para um determinado H . Pelo teorema de Liouville, para cada t , o

campo vectorial $(\mathbf{f}, \mathbf{g})^T$ tem divergência nula, e então

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}(-\mathbf{f}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbf{g},$$

condição necessária e suficiente para que $(\mathbf{g}, -\mathbf{f})^T$ seja o gradiente da função escalar H , ou seja, para que (2.25) seja hamiltoniano.

Se Ω não for simplesmente conexo, então os sistemas com fluxo simplético são, em geral, localmente hamiltonianos: em cada bola $B \subset \Omega$, eles coincidem com um sistema hamiltoniano mas, globalmente, o sistema pode não ser hamiltoniano. Um exemplo típico é dado pelo sistema definido em $\Omega = \mathbb{R}^2 \setminus (0, 0)$ por

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{\mathbf{p}^2 + \mathbf{q}^2}, \quad \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\mathbf{q}}{\mathbf{p}^2 + \mathbf{q}^2}.$$

Em cada bola em Ω o sistema é hamiltoniano, com H dado por um dos argumentos do ponto (\mathbf{p}, \mathbf{q}) . No entanto, o sistema não é globalmente hamiltoniano porque o argumento não pode ser definido como uma única função suave em Ω .

Capítulo 3

Métodos numéricos

Um método numérico, aplicado a uma equação diferencial ordinária, pretende aproximar a solução do problema

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad t \geq t_0, \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0. \quad (3.1)$$

Admite-se que \mathbf{f} é suficientemente bem comportada, que aplica $[t_0, \infty] \times \mathbb{R}^d$ em \mathbb{R}^d ; $\mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^d$ é um vector dado e \mathbb{R}^d é o espaço euclidiano real d -dimensional. No mínimo, \mathbf{f} deve obedecer à condição de Lipschitz

$$\|\mathbf{f}(t, \mathbf{x}) - \mathbf{f}(t, \mathbf{y})\| \leq \lambda \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|, \quad \text{para todo } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d, \quad t \geq t_0. \quad (3.2)$$

A constante real $\lambda > 0$ é independente da escolha de \mathbf{x} e de \mathbf{y} e designa-se por constante de Lipschitz. Se a condição de Lipschitz se verificar, então o sistema de equações diferenciais ordinárias tem solução única.

Admita-se que se pretende calcular a solução numérica de (3.1) no intervalo compacto $[t_0, t_0 + t^*]$, com determinado algoritmo - cobre-se o intervalo com uma malha equidistante e aplica-se o algoritmo numérico de forma a obter-se a solução numérica. Cada malha tem associada a si uma sequência numérica diferente; uma questão pertinente é: à medida que o passo $h \rightarrow 0$, será que a solução numérica tende para a solução exacta de (3.1)? Represente-se a dependência da solução numérica em relação ao passo temporal por $\mathbf{y}_n = \mathbf{y}_{n,h}$, $n = 0, 1, \dots, \lfloor t^*/h \rfloor$. Um método diz-se convergente se, para cada equação diferencial ordinária (3.1), com uma função \mathbf{f} de Lipschitz e para cada $t^* > 0$

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \max_{n=0,1,\dots,\lfloor t^*/h \rfloor} \|\mathbf{y}_{n,h} - \mathbf{y}(t_n)\| = 0,$$

onde $\lfloor \alpha \rfloor \in \mathbb{Z}$ representa a parte inteira de $\alpha \in \mathbb{R}$. A convergência significa que, para cada função Lipschitz, a solução numérica tende para a solução verdadeira, à medida que a malha se

torna mais fina.

Considere-se um integrador arbitrário

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n(\mathbf{f}, h, \mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n), \quad n = 0, 1, \dots$$

para o sistema (3.1); o integrador diz-se de ordem p se

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_n(\mathbf{f}, h, \mathbf{y}(t_0), \mathbf{y}(t_1), \dots, \mathbf{y}(t_n)) = O(h^{p+1}),$$

para toda a função analítica \mathbf{f} e $n = 0, 1, \dots$. O método recupera exactamente toda a solução polinomial de ordem p ou inferior.

3.1 Métodos de Euler: explícito, implícito e simpléctico

3.1.1 O método θ : métodos de Euler explícito e implícito

Qual a informação da expressão (3.1)? Por um lado, sabe-se o valor de \mathbf{y} no ponto $t = t_0$ e, por outro lado, dado qualquer valor da função $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$, no instante $t \geq t_0$, pode saber-se o declive. Qual o valor de \mathbf{y} num novo ponto? A resposta mais elementar e intuitiva é estimar $\mathbf{y}(t)$ pela aproximação $\mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) \approx \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}(t_0))$, para $t \in [t_0, t_0 + h]$, e $h > 0$ suficientemente pequeno. Integrando (3.1), obtém-se

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t) &= \mathbf{y}(t_0) + \int_{t_0}^t \mathbf{f}(\tau, \mathbf{y}(\tau)) d\tau \\ &\approx \mathbf{y}_0 + (t - t_0)\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Dada a sucessão $t_0, t_1 = t_0 + h, t_2 = t_0 + 2h, \dots$, onde $h > 0$ é o passo temporal, represente-se por \mathbf{y}_n a estimativa numérica da solução exacta $\mathbf{y}(t_n)$, $n = 0, 1, \dots$. Da equação (3.3) decorre

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0);$$

continuando este processo de produzir aproximações em t_2, t_3, \dots , obtém-se a regra recursiva

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n), \quad n = 0, 1, \dots, \quad (3.4)$$

designada por método de Euler explícito. O método é explícito porque, no cálculo da aproximação \mathbf{y}_{n+1} , usa-se uma avaliação de \mathbf{f} no valor já conhecido de \mathbf{y}_n . A fórmula (3.4) representa uma função

$$\Phi_h : \mathbf{y}_n \mapsto \mathbf{y}_{n+1},$$

designada por fluxo numérico ou discreto.

O método de Euler (3.4) é convergente e de ordem 1 [17]. Por um lado, o facto do método ser de ordem 1 constitui um inconveniente em problemas que exigem precisão. Mas, por outro lado, a sua grande vantagem é a simplicidade, aliada ao relativo pouco esforço computacional, na medida em que o método de Euler só avalia $\mathbf{f}(t, \mathbf{y})$, da equação 3.1, uma única vez por passo.

O método de Euler aproxima a derivada por uma constante em $[t_n, t_{n+1}]$ pelo seu valor em t_n ; fará mais sentido fazer a aproximação da derivada pela média dos seus valores nos pontos extremos. Neste sentido, uma expressão análoga a (3.3) é

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t) &= \mathbf{y}(t_n) + \int_{t_n}^t \mathbf{f}(\tau, \mathbf{y}(\tau)) d\tau \\ &\approx \mathbf{y}(t_n) + \frac{1}{2}(t - t_n) \{ \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}(t_n)) + \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}(t_{n+1})) \}. \end{aligned}$$

A regra trapezoidal, baseada nesta expressão, é

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{2}h[\mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n) + \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1})]. \quad (3.5)$$

A regra trapezoidal (3.5) é convergente e de ordem 2 [17]. Outra diferença entre o método de Euler e a regra trapezoidal reside na natureza explícita do primeiro e na natureza implícita da segunda; neste último caso, será necessário resolver um sistema de equações não linear. O facto de o método ser implícito e, por isso, ter o custo associado da resolução de um sistema de equações não lineares, não significa, necessariamente, que seja preferível o uso de métodos explícitos; tal é apenas um dos atributos de um método numérico, entre outras características relevantes.

Uma alternativa à aproximação da derivada no método de Euler é, além da regra trapezoidal, a regra do ponto médio implícita, dada por

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}\left(t_n + \frac{1}{2}h, \frac{1}{2}(\mathbf{y}_n + \mathbf{y}_{n+1})\right). \quad (3.6)$$

A regra do ponto médio implícita (3.6) é convergente, de ordem 2 e um caso particular dos métodos Runge-Kutta. (3.6) é um método simétrico, no sentido de que a fórmula fica inalterada após a troca $\mathbf{y}_n \leftrightarrow \mathbf{y}_{n+1}$ e $h \leftrightarrow -h$. Este método é algebricamente estável para qualquer escolha do passo temporal [2, 32].

Considere-se a expressão, para $\theta \in [0, 1]$,

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h[\theta\mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n) + ((1 - \theta)\mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1})], \quad n = 0, 1, \dots \quad (3.7)$$

Se $\theta = 0$ e $\theta = \frac{1}{2}$, recuperam-se os métodos de Euler explícito e a regra trapezoidal, respectivamente. A expressão (3.7) origina um integrador de ordem 2 se $\theta = \frac{1}{2}$ e, caso contrário, de ordem 1, sendo um método convergente para todo o $\theta \in [0, 1]$. O método é explícito para $\theta = 0$ e, caso contrário, é implícito. Uma questão pertinente, a propósito deste método é, qual o seu interesse, além dos casos já citados - para $\theta = 0$, que origina um método explícito (método de Euler explícito) e $\theta = \frac{1}{2}$, que origina um método de ordem 2 (regra trapezoidal)? [17] menciona 3 razões. Em primeiro lugar, o conceito de ordem baseia-se no facto de o erro estar concentrado, principalmente, no primeiro termo da série de Taylor que foi desprezado; tal é verdade, à medida que $h \rightarrow 0$ mas, na realidade, no computador tal não é possível. Assim, em certas circunstâncias, se for desejável anular termos do desenvolvimento da expansão de Taylor que estão inseridos no erro, tal é possível pela escolha de θ ; por exemplo, para $\theta = 2/3$ os termos $O(h^3)$ desaparecem, retendo-se o termo $O(h^2)$. Em segundo lugar, este método é um método geral, baseado, não na mera intuição geométrica, mas numa aproximação mais formal (no desenvolvimento da expansão de Taylor e no teorema da função implícita). A terceira razão apontada é a escolha $\theta = 1$, com grande relevância em termos práticos. Para esta escolha particular, obtém-se

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}), \quad n = 0, 1, \dots, \quad (3.8)$$

conhecido por método de Euler implícito.

Uma iteração da regra trapezoidal, com passo temporal h , é equivalente a uma iteração do método de Euler explícito com passo temporal $\frac{h}{2}$, seguido de uma iteração do método de Euler implícito com passo temporal $\frac{h}{2}$. De forma similar, a regra do ponto médio implícita corresponde ao método de Euler implícito, seguido do método de Euler explícito.

Um método numérico diz-se *A*-estável quando se pode escolher o passo de integração h (pelo menos, para sistemas lineares) atendendo apenas as considerações de precisão, ou seja, não é necessário levar em conta restrições ao tamanho do passo impostas pela estabilidade do método. A regra trapezoidal é *A*-estável, mas o método de Euler explícito não.

3.1.2 O método de Euler simpléctico

Para sistemas do tipo

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}} &= \mathbf{a}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \dot{\mathbf{v}} &= \mathbf{b}(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \end{aligned} \quad (3.9)$$

usa-se o método de Euler particionado ou simplético

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + h\mathbf{a}(\mathbf{u}_{n+1}, \mathbf{v}_n) \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_n + h\mathbf{b}(\mathbf{u}_{n+1}, \mathbf{v}_n).\end{aligned}\tag{3.10}$$

O método de Euler simplético (3.10) trata a variável \mathbf{u} pelo método de Euler implícito e a variável \mathbf{v} pelo método de Euler explícito.

3.2 Métodos Runge-Kutta: explícitos, implícitos e particionados

Os métodos da família Runge-Kutta podem ser explícitos, implícitos ou particionados.

3.2.1 Métodos Runge-Kutta explícitos

A forma integral do sistema (3.1) é dada por

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{y}(t_0) + \int_{t_0}^t \mathbf{f}(\tau, \mathbf{y}(\tau)) d\tau.$$

Conforme se observa, a solução passa pelo cálculo de um integral; neste sentido, o cálculo da solução numérica passa pela integração numérica do integral. É usual substituir o integral por uma soma finita, procedimento conhecido como quadratura. Seja γ uma função não negativa no intervalo (a, b) , tal que

$$0 < \int_a^b \gamma(\tau) d\tau < \infty, \quad \left| \int_a^b \tau^j \gamma(\tau) d\tau \right| < \infty, \quad j = 1, 2, \dots.$$

A aproximação do integral por uma soma finita é dada pela expressão

$$\int_a^b f(\tau) \gamma(\tau) d\tau \approx \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j),\tag{3.11}$$

onde os números b_1, b_2, \dots, b_ν e c_1, c_2, \dots, c_ν , independentes da função f , são as ponderações e os nodos da quadratura, respectivamente. É possível ter $a = -\infty$ ou $b = +\infty$. Admita-se que a quadratura coincide com o integral exacto quando f é um polinómio arbitrário de grau $p - 1$. Para cada função f , com p derivadas suaves, tem-se que

$$\left| \int_a^b f(\tau) \gamma(\tau) d\tau - \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j) \right| \leq c \max_{a \leq t \leq b} |f^{(p)}(t)|,$$

onde a constante $c > 0$ é independente de f [17]. Neste caso, a quadratura diz-se de ordem p .

Como aplicar uma quadratura ao sistema (3.1)? Integra-se de t_n a $t_{n+1} = t_n + h$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t_{n+1}) &= \mathbf{y}(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\tau, \mathbf{y}(\tau)) d\tau \\ &= \mathbf{y}(t_n) + h \int_0^1 \mathbf{f}(t_n + h\tau, \mathbf{y}(t_n + h\tau)) d\tau, \end{aligned}$$

substituindo o segundo integral por uma quadratura, resultando o «método»

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^{\nu} b_j \mathbf{f}(t_n + c_j h, \mathbf{y}(t_n + c_j h)), \quad n = 0, 1, \dots$$

O problema que se levanta é o desconhecimento do valor de \mathbf{y} nos nodos $t_n + c_1 h, t_n + c_2 h, \dots, t_n + c_\nu h$ e, por isso, torna-se necessário recorrer a uma aproximação. Represente-se a aproximação a $\mathbf{y}(t_n + c_j h)$ por $\boldsymbol{\xi}_j, j = 1, 2, \dots, \nu$. Inicie-se o processo com $c_1 = 0$, já que desta forma se obtém $\boldsymbol{\xi}_1 = \mathbf{y}_n$. A ideia que está subjacente aos métodos de Runge-Kutta explícitos é expressar cada $\boldsymbol{\xi}_j, j = 2, 3, \dots, \nu$ por actualizar \mathbf{y}_n como a combinação linear de $\mathbf{f}(t_n, \boldsymbol{\xi}_1), \mathbf{f}(t_n + c_2 h, \boldsymbol{\xi}_2), \dots, \mathbf{f}(t_n + c_{j-1} h, \boldsymbol{\xi}_{j-1})$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}_1 &= \mathbf{y}_n \\ \boldsymbol{\xi}_2 &= \mathbf{y}_n + h a_{2,1} \mathbf{f}(t_n, \boldsymbol{\xi}_1) \\ \boldsymbol{\xi}_3 &= \mathbf{y}_n + h a_{3,1} \mathbf{f}(t_n, \boldsymbol{\xi}_1) + h a_{3,2} \mathbf{f}(t_n + c_2 h, \boldsymbol{\xi}_2) \\ &\vdots \\ \boldsymbol{\xi}_\nu &= \mathbf{y}_n + h \sum_{i=1}^{\nu-1} a_{\nu,i} \mathbf{f}(t_n + c_i h, \boldsymbol{\xi}_i) \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^{\nu} b_j \mathbf{f}(t_n + c_j h, \boldsymbol{\xi}_j). \end{aligned} \tag{3.12}$$

Diz-se que (3.12) tem ν etapas. A matriz $A = (a_{j,i})_{j,i=1,2,\dots,\nu}$, onde os elementos que não constam são nulos, é a matriz *RK*; as ponderações *RK* e os nodos *RK* são dados, respectivamente, por

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_\nu \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_\nu \end{pmatrix}.$$

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\ \hline & 0 & 1 \end{array}, \quad \begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \\ \hline & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{array}, \quad \text{e} \quad \begin{array}{c|cc} 0 & & \\ 1 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

Tabela 3.1: Métodos Runge-Kutta de ordem 2

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\ 1 & -1 & 2 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

Tabela 3.2: Método Runge-Kutta clássico

Esta informação é apresentada numa tabela *RK*

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & A \\ \hline & \mathbf{b}^T \end{array}$$

Mas, como escolher a matriz *RK*? Concretizando para $\nu = 2$, [17] mostra que

$$b_1 + b_2 = 1, \quad b_2 c_2 = \frac{1}{2}, \quad a_{2,1} = c_2. \tag{3.13}$$

As condições (3.13) não definem de forma única um método Runge-Kutta explícito de ordem 2. As escolhas habituais passam por uma das tabelas *RK* que constam da tabela 3.1. As condições para que um método Runge-Kutta explícito seja de terceira ordem são

$$b_1 + b_2 + b_3 = 1, \quad b_2 c_2 + b_3 c_3 = \frac{1}{2}, \quad b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = \frac{1}{3}, \quad b_3 a_{3,2} c_2 = \frac{1}{6}. \tag{3.14}$$

Os exemplos mais relevantes são o método Runge-Kutta clássico (tabela 3.2) e o método de Nyström (tabela 3.3). O método de Runge-Kutta explícito de quarta ordem mais conhecido é o que consta da tabela 3.4. Métodos Runge-Kutta explícitos de ordem ν , com ν -etapas, existem somente para $\nu \leq 4$. Para obter ordem cinco, são necessárias seis etapas. Nenhum método Runge-Kutta explícito pode ser *A*-estável.

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & & \\ \frac{3}{4} & 0 & \frac{2}{3} & \\ \hline & \frac{1}{4} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} \end{array}$$

Tabela 3.3: Método de Nyström

0				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$		
1	0	0	1	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$

Tabela 3.4: Método Runge-Kutta de ordem 4

3.2.2 Métodos Runge-Kutta implícitos

Formulação dos métodos Runge-Kutta implícitos

Considere-se o algoritmo mais geral do que (3.12):

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}_j &= \mathbf{y}_n + h \sum_{i=1}^{\nu} a_{j,i} \mathbf{f}(t_n + c_i h, \boldsymbol{\xi}_i), & j = 1, 2, \dots, \nu, \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^{\nu} b_j \mathbf{f}(t_n + c_j h, \boldsymbol{\xi}_j). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Neste caso, a matriz RK , $A = (a_{j,i})_{j,i=1,2,\dots,\nu}$, é arbitrária, ao passo que em (3.12) era estritamente triangular inferior. Impõe-se a igualdade

$$\sum_{i=1}^{\nu} a_{j,i} = c_j, \quad j = 1, 2, \dots, \nu,$$

para que o método tenha ordem não trivial.

O algoritmo (3.15) é um sistema de νd equações algébricas implícitas, com $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$. Esta desvantagem, relativamente ao método explícito, pode ser compensada por propriedades de estabilidade superiores.

Como exemplo, considere-se o método Runge-Kutta implícito com duas etapas

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}_1 &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}h \left[\mathbf{f}(t_n, \boldsymbol{\xi}_1) - \mathbf{f}(t_n + \frac{2}{3}h, \boldsymbol{\xi}_2) \right] \\ \boldsymbol{\xi}_2 &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{12}h \left[3\mathbf{f}(t_n, \boldsymbol{\xi}_1) + 5\mathbf{f}(t_n + \frac{2}{3}h, \boldsymbol{\xi}_2) \right] \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}h \left[\mathbf{f}(t_n, \boldsymbol{\xi}_1) + 3\mathbf{f}(t_n + \frac{2}{3}h, \boldsymbol{\xi}_2) \right], \end{aligned} \quad (3.16)$$

cujas tabelas RK é a que consta da tabela 3.5, método de ordem três [17].

0	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$
2	$\frac{1}{4}$	$\frac{5}{4}$
3	$\frac{1}{4}$	$\frac{12}{4}$
	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$

Tabela 3.5: Método Runge-Kutta implícito de ordem 2

Métodos de colocação

Um importante subconjunto dos métodos de Runge-Kutta implícitos são os métodos de colocação. Considere-se uma aproximação alternativa à solução numérica do sistema (3.1), e assumase que a integração já foi feita até (t_n, \mathbf{y}_n) , pretende-se, agora, avançar para $(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1})$. Com este propósito, escolham-se ν parâmetros de colocação distintos, c_1, c_2, \dots, c_ν e procure-se o polinómio \mathbf{u} , de grau ν , tal que

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t_n) &= \mathbf{y}_n \\ \mathbf{u}'(t_n + c_j h) &= \mathbf{f}(t_n + c_j h, \mathbf{u}(t_n + c_j h)), \quad j = 1, 2, \dots, \nu. \end{aligned} \quad (3.17)$$

\mathbf{u} obedece à condição inicial e, também, satisfaz a equação diferencial (3.1) em, exactamente, ν pontos distintos. Um método de colocação consiste em determinar tal polinómio \mathbf{u} , de grau ν , e fazer

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{u}(t_{n+1}).$$

Para $\nu = 1$, o polinómio tem a forma $\mathbf{u}(t) = \mathbf{y}_0 + (t - t_0)\mathbf{k}$, com

$$\mathbf{k} = \mathbf{f}(t_0 + c_1 h, \mathbf{y}_0 + h c_1 \mathbf{k}).$$

Os métodos de Euler explícito, implícito e a regra do ponto médio são métodos de colocação, com $c_1 = 0$, $c_1 = 1$ e $c_1 = 1/2$, respectivamente. Se $\nu = 2$, com $c_1 = 0$ e $c_2 = 1$, obtém-se a regra trapezoidal.

O método de colocação (3.17) é um método de Runge-Kutta implícito, conforme se depreende do teorema seguinte [17].

Teorema 3.1. *Sejam*

$$q(t) = \prod_{j=1}^{\nu} (t - c_j), \quad q_l = \frac{q(t)}{t - c_l}, \quad l = 1, 2, \dots, \nu,$$

e

$$a_{j,i} = \int_0^{c_j} \frac{q_i(\tau)}{q_i(c_i)} d\tau, \quad j, i = 1, 2, \dots, \nu, \quad (3.18)$$

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array}$$

Tabela 3.6: Regra do ponto médio implícita

$$b_j = \int_0^1 \frac{q_j(\tau)}{q_j(c_j)} d\tau, \quad j = 1, 2, \dots, \nu. \quad (3.19)$$

O método de colocação (3.17) é idêntico ao método de Runge-Kutta implícito

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & A \\ \hline & \mathbf{b}^T \end{array}$$

No entanto, nem todos os métodos Runge-Kutta implícitos têm origem num método de colocação, ou seja, os métodos de colocação são um caso particular dos métodos Runge-Kutta implícitos.

Se as formulações (3.15) e (3.17) são idênticas, por que e quando usar uma ou outra? Em termos práticos, a formulação (3.15) é a adequada, ao passo que a formulação (3.17) é mais conveniente na análise da ordem do método, fazendo uso do teorema e do corolário que se seguem.

Teorema 3.2. *Admita-se que*

$$\int_0^1 q(\tau) \tau^j d\tau = 0, \quad j = 0, 1, \dots, m-1,$$

para algum $m \in \{0, 1, \dots, \nu\}$. Então, o método de colocação (3.17) é de ordem $\nu + m$.

Seja o conjunto de todos os polinómios reais de grau ν representado por \mathbb{P}_ν .

Corolário 3.1. *Sejam c_1, c_2, \dots, c_ν zeros do polinómio $P_\nu \in \mathbb{P}_\nu$, que é ortogonal com a função $\gamma(t) = 1$, $0 \leq t \leq 1$. Então o método de colocação subjacente (3.17) é de ordem 2ν .*

Os métodos de ν -etapas e de ordem 2ν que se enquadram neste corolário designam-se por métodos de Gauss-Legendre, pois são quadraturas de Gauss que utilizam os polinómios ortogonais de Legendre. Os métodos de Gauss-Legendre são A -estáveis para todo o $\nu \geq 1$. O polinómio P_ν pode ser obtido de forma explícita, usando a fórmula do termo geral da sucessão dos polinómios de Legendre

$$P_\nu(t) = \frac{(\nu!)^2}{(2\nu)!} \sum_{k=0}^{\nu} (-1)^{\nu-k} \binom{\nu}{k} \binom{\nu+k}{k} t^k.$$

Para $\nu = 1$, vem $P_1(t) = t - \frac{1}{2}$, ou seja, $c_1 = \frac{1}{2}$. O método, descrito pela tabela 3.6, é a regra do ponto médio implícita (3.6). Se $\nu = 2$, resulta $P_2(t) = t^2 - t + \frac{1}{6}$, ou seja, $c_1 = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$ e $c_2 = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$.

$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6}$
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4}$
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

Tabela 3.7: Método Runge-Kutta implícito de ordem 4

$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36}$	$\frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15}$	$\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24}$	$\frac{2}{9}$	$\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24}$
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30}$	$\frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15}$	$\frac{5}{36}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$	$\frac{5}{18}$

Tabela 3.8: Método de Gauss-Legendre de ordem 6

As fórmulas (3.18) e (3.19) produzem o método de Runge-Kutta implícito de quarta ordem, com duas etapas, que consta da tabela 3.7. Este integrador é um integrador simétrico [13]. O cálculo de sistemas algébricos não lineares originários de métodos de Runge-Kutta implícitos com ν grande é pesado e computacionalmente dispendioso, mas pode ser compensado pelo aumento da ordem do método. O compromisso mais ambicioso entre os custos de implementação e a ordem do método é dado pelo método de Gauss-Legendre com três etapas (tabela 3.8) [17]. Os métodos de Lobatto IIIA são métodos de colocação obtidos com $c_1 = 0$ e $c_s = 1$, de forma a que a ordem do método seja máxima. Para que tal se verifique, os nodos devem ser os zeros de

$$\frac{d^{\nu-2}}{dx^{\nu-2}} (x^{\nu-1}(x-1)^{\nu-1}), \tag{3.20}$$

obtendo-se uma quadratura de ordem $p = 2\nu - 2$ [13, 14]. Se $\nu = 2$ obtém-se a regra trapezoidal. Se $\nu = 3$ obtém-se a tabela 3.9, que corresponde ao método Lobatto IIIA de ordem 4. Este integrador é um integrador simétrico [13].

Métodos de colocação descontínuos

Os métodos de colocação descontínuos são uma modificação da ideia dos métodos de colocação. Sejam $c_2, \dots, c_{\nu-1}$ números reais distintos (em geral, $0 \leq c_i \leq 1$) e b_1, b_ν dois reais arbitrários.

0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{24}$	$-\frac{1}{24}$
1	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$
	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$

Tabela 3.9: Método Lobatto IIIA de ordem 4

0	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{6}$	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	0
1	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	0
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$

Tabela 3.10: Método Lobatto IIIB de ordem 4

O método de colocação descontínuo é obtido a partir do polinómio de grau $\nu - 2$ que satisfaz

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}(t_0) &= \mathbf{y}_0 - hb_1(\mathbf{u}'(t_0) - \mathbf{f}(t_0, \mathbf{u}(t_0))) \\
 \mathbf{u}'(t_0 + c_i h) &= \mathbf{f}(t_0 + c_i h, \mathbf{u}(t_0 + c_i h)), \quad i = 2, \dots, \nu - 1 \\
 \mathbf{y}_1 &= \mathbf{u}(t_1) - hb_\nu(\mathbf{u}'(t_1) - \mathbf{f}(t_1, \mathbf{u}(t_1))).
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Os métodos de colocação descontínuos são equivalentes aos métodos Runge-Kutta implícitos [13].

Considerem-se, novamente, os zeros da expressão (3.20); tem-se que $c_1 = 0$ e $c_\nu = 1$. Agora, se $b_1 \neq 0$ e $b_\nu \neq 0$, obtêm-se os métodos Lobatto IIIB, métodos de ordem $p = 2\nu - 2$. O método Lobatto IIIB de ordem 4 é descrito pela tabela 3.10. Este integrador é um integrador simétrico [13].

3.2.3 Métodos Runge-Kutta particionados

Formulação

Considerem-se as equações diferenciais na forma particionada

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{z}), \quad \dot{\mathbf{z}} = \mathbf{g}(\mathbf{y}, \mathbf{z}), \tag{3.22}$$

onde \mathbf{y} e \mathbf{z} são vectores que podem ter dimensões diferentes.

A ideia subjacente aos métodos Runge-Kutta particionados é tratar a variável \mathbf{y} por um método (a_{ij}, b_i) e a variável \mathbf{z} por um outro método (A_{ij}, B_i) . Estes métodos são especificados por duas tabelas

c_1	a_{11}	\cdots	$a_{\nu 1}$	e	C_1	A_{11}	\cdots	$A_{\nu 1}$
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots		\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
c_ν	$a_{\nu 1}$	\cdots	$a_{\nu \nu}$		C_ν	$A_{\nu 1}$	\cdots	$A_{\nu \nu}$
	b_1	\cdots	b_ν			B_1	\cdots	B_ν

Um método Runge-Kutta particionado para a solução de (3.22) é dado por

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}_i &= \mathbf{f} \left(\mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \mathbf{k}_j, \mathbf{z}_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} \mathbf{l}_j \right) \\
\mathbf{l}_i &= \mathbf{g} \left(\mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \mathbf{k}_j, \mathbf{z}_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} \mathbf{l}_j \right) \\
\mathbf{y}_1 &= \mathbf{y}_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{k}_i \\
\mathbf{z}_1 &= \mathbf{z}_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} B_i \mathbf{l}_i
\end{aligned} \tag{3.23}$$

O método de Euler simplético (3.10) é dado pela combinação do método de Euler implícito, $b_1 = 1, a_{11} = 1$ com o método de Euler explícito $B_1 = 1, A_{11} = 0$, ou seja, o método de Euler simplético é um método Runge-Kutta particionado.

Para que um método Runge-Kutta particionado tenha ordem 2, as seguintes condições devem ser satisfeitas [13]:

$$\sum_{ij} b_i A_{ij} = 1/2 \quad \text{e} \quad \sum_{ij} B_i a_{ij} = 1/2, \tag{3.24}$$

admitindo que as condições (3.13) se verificam. As condições (3.24) são automaticamente satisfeitas por métodos particionados com os mesmo nodos na quadratura, o que se traduz em

$$c_i = C_i, \quad \text{para todo o } i, \tag{3.25}$$

onde $c_i = \sum_j a_{ij}$ e $C_i = \sum_j A_{ij}$. No caso de (3.25) se verificar, as condições para que um método Runge-Kutta particionado seja de ordem 3 são

$$\sum_{ij} b_i A_{ij} c_j = 1/6 \quad \text{e} \quad \sum_{ij} B_i a_{ij} c_j = 1/6. \tag{3.26}$$

O par Lobatto IIIA - IIIB

Para um ν arbitrário, a combinação do método Lobatto IIIA e IIIB é adequada para sistemas hamiltonianos. Prova-se o teorema seguinte [13].

Teorema 3.3. *O método Runge-Kutta particionado, que combina o método Lobatto IIIA de ν -etapas com o método Lobatto IIIB de ν -etapas, é de ordem $2\nu - 2$.*

Métodos de Nyström

Considerem-se as equações diferenciais de segunda ordem

$$\ddot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}(t, \mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}). \quad (3.27)$$

Introduzindo a variável $\mathbf{z} = \dot{\mathbf{y}}$, o problema (3.27) assume a forma de um sistema particionado

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{z}, \quad \dot{\mathbf{z}} = \mathbf{g}(t, \mathbf{y}, \mathbf{z}). \quad (3.28)$$

Considerem-se os números reais $c_i, A_{ij}, B_i, \bar{a}_{ij}$ e \bar{b}_i , onde

$$\bar{a}_{ij} = \sum_{k=1}^{\nu} a_{ik} A_{kj}, \quad \bar{b}_i = \sum_{k=1}^{\nu} b_k A_{ki}. \quad (3.29)$$

Um método de Nyström, solução do sistema (3.27), é dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{l}_i &= \mathbf{g} \left(t_0 + c_i h, \mathbf{y}_0 + c_i h \dot{\mathbf{y}}_0 + h^2 \sum_{j=1}^{\nu} \bar{a}_{ij} \mathbf{l}_j, \dot{\mathbf{y}}_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} \mathbf{l}_j \right) \\ \mathbf{y}_1 &= \mathbf{y}_0 + h \dot{\mathbf{y}}_0 + h^2 \sum_{i=1}^{\nu} \bar{b}_i \mathbf{l}_i \\ \dot{\mathbf{y}}_1 &= \dot{\mathbf{y}}_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} B_i \mathbf{l}_i. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Um método de Nyström é de ordem p se $\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}(t_0 + h) = O(h^{p+1})$ e $\dot{\mathbf{y}}_1 - \dot{\mathbf{y}}(t_0 + h) = O(h^{p+1})$.

Um sistema de equações diferenciais da forma

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{q}), \quad \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{v}, \quad (3.31)$$

ou então, de forma equivalente,

$$\frac{d^2\mathbf{q}}{dt^2} = \mathbf{f}(\mathbf{q}), \quad (3.32)$$

pode ser eficientemente integrado por um método de Runge-Kutta-Nyström [41], com a tabela

γ_1	α_{11}	\cdots	$\alpha_{\nu 1}$
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
γ_ν	$\alpha_{\nu 1}$	\cdots	$\alpha_{\nu \nu}$
	β_1	\cdots	β_ν
	b_1	\cdots	b_ν

onde

$$\begin{aligned}\beta_i &= \sum_{j=1}^{\nu} B_j a_{ji}, & i &= 1, \dots, \nu, \\ \gamma_i &= \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij}, & i &= 1, \dots, \nu, \\ \alpha_{ij} &= \sum_{k=1}^{\nu} A_{ik} a_{kj} & i, j &= 1, \dots, \nu.\end{aligned}\tag{3.33}$$

As fases intermédias \mathbf{Q}^i são

$$\mathbf{Q}^i = \mathbf{q}^n + h\gamma_i \mathbf{v}_n + h^2 \sum_{j=1}^{\nu} \alpha_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{Q}^j, t_n + \gamma_j h),\tag{3.34}$$

e as aproximações são dadas por

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_n + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{f}(\mathbf{Q}^i, t_n + \gamma_i h) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h\mathbf{v}_n + h^2 \sum_{i=1}^{\nu} \beta_i \mathbf{f}(\mathbf{Q}^i, t_n + \gamma_i h).\end{aligned}\tag{3.35}$$

Problemas com hamiltonianas separáveis

Considere-se um caso particular das equações (3.22)

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{q}), \quad \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{g}(\mathbf{p}),\tag{3.36}$$

onde as p componentes são integradas por um método Runge-Kutta e as q componentes por um método Runge-Kutta diferente. Neste caso, obtém-se [41]

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_n + h_{n+1} \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{f}(\mathbf{Q}_i, t_n + C_i h_{n+1}) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h_{n+1} \sum_{i=1}^{\nu} B_i \mathbf{g}(\mathbf{P}_i),\end{aligned}\tag{3.37}$$

onde as etapas intermédias \mathbf{P}_i e \mathbf{Q}^i são dadas por

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_i &= \mathbf{p}_n + h_{n+1} \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{Q}^j, t_n + C_j h_{n+1}) \\ \mathbf{Q}^i &= \mathbf{q}^n + h_{n+1} \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} \mathbf{g}(\mathbf{P}_j),\end{aligned}\tag{3.38}$$

com $i = 1, 2, \dots, \nu$ e $C_i = \sum_j A_{ij}$.

No caso de $a_{ij} = A_{ij} = 0$, para $i \leq j$, o método é explícito. Se $a_{ij} = 0$ para $i < j$ e $A_{ij} = 0$ para $i \leq j$, o método ainda é explícito, devido à estrutura especial de (3.36); Analogamente se $a_{ij} = 0$ para $i \leq j$ e $A_{ij} = 0$ para $i < j$. Se $a_{ij} = A_{ij} = 0$, para $i < j$, então o método é implícito.

3.3 Método Störmer-Verlet

O método Störmer-Verlet com passo de integração fixo pode ser aplicado a sistemas hamiltonianos com função Hamiltoniana separável e, também, com função Hamiltoniana não separável ou geral.

3.3.1 Método Störmer-Verlet aplicado a sistemas com Hamiltoniana separável

Considere-se uma Hamiltoniana da forma $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$, onde $T(\mathbf{p})$ é uma função quadrática. O sistema hamiltoniano resultante é

$$\dot{\mathbf{q}} = M^{-1}\mathbf{p}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\nabla V(\mathbf{q}),$$

onde $M = \text{diag}(m_1 I, \dots, m_N I)$, I é a matriz identidade tridimensional e $\nabla V = (\partial V / \partial \mathbf{q}^T)$ representa o gradiente de V . Este sistema é equivalente à equação diferencial de segunda ordem

$$\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{f}(\mathbf{q}),\tag{3.39}$$

onde $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = -M^{-1}\nabla V(\mathbf{q})$ não depende de $\dot{\mathbf{q}}$. Muitos problemas em astronomia, dinâmica molecular e outras áreas da física assumem esta forma. A discretização natural de (3.39) é

$$\mathbf{q}^{n+1} - 2\mathbf{q}^n + \mathbf{q}^{n-1} = h^2 \mathbf{f}(\mathbf{q}^n),\tag{3.40}$$

que determina \mathbf{q}^{n+1} , quando \mathbf{q}^n e \mathbf{q}^{n-1} são conhecidos. O método (3.40) designa-se por método Störmer no campo da astronomia, método Verlet no campo da dinâmica molecular e *leapfrog* no campo das equações diferenciais parciais.

(3.40) é uma formulação de passo duplo; para obter uma formulação de passo simples, procede-se

como se segue. A introdução da velocidade $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{q}}$ transforma a equação (3.39) num sistema de primeira ordem

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{v}, \quad \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{f}(\mathbf{q}). \quad (3.41)$$

Agora, considerem-se as seguintes aproximações discretas

$$\mathbf{v}_n = \frac{\mathbf{q}^{n+1} - \mathbf{q}^{n-1}}{2h}, \quad \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{q}^n - \mathbf{q}^{n-1}}{h}, \quad \mathbf{q}^{n-\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{q}^n + \mathbf{q}^{n-1}}{2}. \quad (3.42)$$

Para o problema (3.39), são dadas as condições iniciais $\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}^0$ e $\dot{\mathbf{q}}(0) = \mathbf{v}_0$; o valor \mathbf{q}^1 , necessário para iniciar a integração em (3.40), é

$$\mathbf{q}^1 = \mathbf{q}^0 + h\mathbf{v}_0 + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^0),$$

obtido fazendo $n = 0$ em (3.40), na expressão \mathbf{v}_n em (3.42) e eliminando o valor \mathbf{q}^{-1} . Substituindo as expressões (3.42) em (3.40), obtém-se

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^n) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{n+1}), \end{aligned} \quad (3.43)$$

método de passo simples explícito

$$\Phi_h : (\mathbf{q}^n, \mathbf{v}_n) \mapsto (\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{v}_{n+1}),$$

para o sistema de primeira ordem (3.41).

Uma variante do método ocorre nos pontos intermédios $(\mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}}, \mathbf{q}^{n-\frac{1}{2}}) \mapsto (\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}})$ [12],

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^n &= \mathbf{q}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}} \\ \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}} + h\mathbf{f}(\mathbf{q}^n) \\ \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}^n + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Encadeando as equações (3.43) e (3.44), obtém-se o seguinte método

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}} + h\mathbf{f}(\mathbf{q}^n) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (3.45)$$

que é mais económico em termos de implementação e numericamente mais estável do que (3.40) [14].

O método Störmer-Verlet pode ser perspectivado como a composição de dois métodos de Euler simpléticos. Das expressões (3.43) e (3.44) decorrem os algoritmos $(\mathbf{v}_n, \mathbf{q}^n) \mapsto (\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}})$

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^n) \\ \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}^n + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}},\end{aligned}\tag{3.46}$$

e $(\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}}) \mapsto (\mathbf{v}_{n+1}, \mathbf{q}^{n+1})$

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{n+1}).\end{aligned}\tag{3.47}$$

Os métodos (3.46) e (3.47) enquadram-se na expressão (3.10), ou seja, ambos são métodos de Euler simpléticos, na medida em que uma das variáveis é usada no valor antigo e a outra variável no valor mais recente.

O algoritmo (3.43) é dado pela composição dos algoritmos (3.46) e (3.47), ao passo que o algoritmo (3.44) é dado pela composição dos algoritmos (3.47) e (3.46), de tal forma que é legítimo afirmar que o método de Störmer-Verlet é dado pela composição de dois métodos de Euler simpléticos.

O método Störmer-Verlet também pode ser visto como um método de decomposição ou separável [11, 13]. Um método diz-se separável se for possível decompor o campo vectorial em dois campos vectoriais integráveis e, então, tratá-los separadamente. Considere-se o campo vectorial $(\mathbf{v}, \mathbf{f}(\mathbf{q}))$ de (3.41) separado como a soma dos campos vectoriais $(\mathbf{v}, \mathbf{0})$ e $(\mathbf{0}, \mathbf{f}(\mathbf{q}))$. Os fluxos exactos destes dois campos vectoriais são dados por

$$\psi_t^{[1]} : \begin{cases} \mathbf{q}^1 &= \mathbf{q}^0 + t \cdot \mathbf{v}_0 \\ \mathbf{v}_1 &= \mathbf{v}_0 \end{cases} \quad \psi_t^{[2]} : \begin{cases} \mathbf{q}^1 &= \mathbf{q}^0 \\ \mathbf{v}_1 &= \mathbf{v}_0 + t \cdot \mathbf{f}(\mathbf{q}^0). \end{cases}\tag{3.48}$$

O método simplético (3.46) é dado pela composição de $\psi_{\frac{h}{2}}^{[2]}$ com $\psi_{\frac{h}{2}}^{[1]}$, ao passo que o método simplético (3.47) é dado pela composição de $\psi_{\frac{h}{2}}^{[1]}$ com $\psi_{\frac{h}{2}}^{[2]}$, ou seja,

$$(3.46) = \psi_{\frac{h}{2}}^{[1]} \circ \psi_{\frac{h}{2}}^{[2]}$$

$$(3.47) = \psi_{\frac{h}{2}}^{[2]} \circ \psi_{\frac{h}{2}}^{[1]}.$$

Mas, atendendo a que

$$(3.43) = (3.47) \circ (3.46)$$

$$(3.44) = (3.46) \circ (3.47)$$

obtém-se

$$\begin{aligned} \Phi_h^{(3.43)} &= \psi_{\frac{h}{2}}^{[2]} \circ \psi_h^{[1]} \circ \psi_{\frac{h}{2}}^{[2]} \\ \Phi_h^{(3.44)} &= \psi_{\frac{h}{2}}^{[1]} \circ \psi_h^{[2]} \circ \psi_{\frac{h}{2}}^{[1]}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Esta forma de fazer a composição de fluxos de campos vectoriais separados é conhecida como composição de Strang.

O método Stormer-Verlet (3.43) pode ser visto como um método Runge-Kutta particionado com as tabelas

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \quad \text{e} \quad \begin{array}{c|cc} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

A ordem do método Störmer-Verlet é ordem 2 porque, sendo um método Runge-Kutta particionado, enquadra-se nas condições (3.24). Ora, uma desvantagem do método Störmer-Verlet reside no facto de, precisamente, ser um método de ordem 2 e, por isso, ineficiente para computações que exigem muita precisão (por exemplo, simulações do movimento planetário) [11]. No entanto, o seu uso é tão popular já que combina dois aspectos bastante favoráveis: por um lado, é um método explícito e, por outro lado, só é necessário calcular a força $-\nabla V$ uma única vez, por cada passo (enquanto que, por exemplo, um método Runge-Kutta de ordem 2 tem de avaliar a força duas vezes).

O método Störmer-Verlet (3.43) é um método de Nyström (3.30) para problemas da forma $\ddot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}(t, \mathbf{y})$. Considera-se $\nu = 2$ e faz-se $c_1 = 0, c_2 = 1, \bar{a}_{11} = \bar{a}_{12} = \bar{a}_{22} = 0, \bar{a}_{21} = 1/2, \bar{b}_1 = 1/2, \bar{b}_2 = 0$ e $B_1 = B_2 = 1/2$.

Para o Störmer-Verlet (3.44), considera-se $\nu = 1$ e faz-se $c_1 = 1/2, \bar{a}_{11} = 0$ e $\bar{b}_1 = B_1 = 1$.

3.3.2 Método Störmer-Verlet aplicado a sistemas com Hamiltoniana não separável ou geral

Considere-se o problema mais geral [12]

$$\dot{q} = g(q, v) \quad \text{e} \quad \dot{v} = f(q, v). \quad (3.50)$$

Numa primeira etapa, generalizam-se as expressões 3.46 e 3.47 da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_n + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}^n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) \\ \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}^n + \frac{h}{2} \mathbf{g}(\mathbf{q}^n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) \end{aligned} \quad (3.51)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} \mathbf{g}(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}). \end{aligned} \quad (3.52)$$

A extensão do método Störmer-Verlet ao caso de uma Hamiltoniana não separável é feita pela composição dos métodos 3.51 e 3.52.

Fazendo a composição (3.52 \circ 3.51), resulta

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_n + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}^n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + \frac{h}{2} \left(\mathbf{g}(\mathbf{q}^n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) + \mathbf{g}(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) \right) \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}). \end{aligned} \quad (3.53)$$

A versão dual resulta da composição (3.51 \circ 3.52)

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^n &= \mathbf{q}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} \mathbf{g}(\mathbf{q}^n, \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}}) \\ \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} \left(\mathbf{f}(\mathbf{q}^n, \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}}) + \mathbf{f}(\mathbf{q}^n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) \right) \\ \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}^n + \frac{h}{2} \mathbf{g}(\mathbf{q}^n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}). \end{aligned} \quad (3.54)$$

Note-se que a primeira equação do método 3.53 é, agora, implícita para $\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}$, e a segunda equação é implícita para \mathbf{q}^{n+1} , sendo que a única explícita é a última equação.

Capítulo 4

Integradores geométricos

É desejável que um método numérico partilhe as propriedades geométricas do sistema de equações diferenciais que pretende integrar. Assumindo que o integrador numérico induz um fluxo discreto ψ_h em \mathbb{R}^{2d} , considerado uma aproximação do fluxo contínuo, essa aproximação terá tanto mais «qualidade» quanto melhor reproduzir o fluxo contínuo. Por exemplo, nos sistemas hamiltonianos, o fluxo é simplético - então, será desejável que o integrador numérico seja simplético. Ou então, se o fluxo conservar determinadas quantidades - no caso hamiltoniano, nomeadamente, a energia e as quantidades de movimento - o integrador numérico, idealmente, também o deverá fazer.

Neste sentido, algumas questões se colocam; naturalmente, uma delas é, sem dúvida, como construir integradores desta natureza, integradores geométricos? Será que algum dos integradores chamados clássicos, que foram desenhados sem levar em conta a preservação das características qualitativas do sistema a integrar, são integradores geométricos? Ou, só o serão em determinadas condições? Outro ponto a ter em mente é a questão da opção - se não for possível que o integrador partilhe todas as características do sistema contínuo, quais as características a escolher? Atente-se à escolha entre simplecticidade e conservação da energia. Um integrador simplético ψ_h com passo temporal constante não pode conservar, exactamente, a energia - excepto nos casos em que ψ_h coincide com o fluxo do sistema de equações diferenciais ou então, é uma sua reparametrização (por exemplo, os sistemas integráveis são uma excepção a esta regra) [8]. Consequentemente, em geral, um integrador numérico não pode, em simultâneo, conservar a energia e a estrutura simplética - este resultado induziu uma dicotomia na literatura entre, por um lado, integradores que conservam a estrutura simplética e a quantidade de movimento, e por outro lado, integradores que conservam a energia e a quantidade de movimento. Neste contexto, e tendo em mente que um sistema hamiltoniano conserva a energia e a estrutura simplética, a questão pertinente a colocar é - opta-se por conservar a energia ou por conservar a estrutura simplética? Embora a opção dependa da aplicação específica, a resposta pode ser ponderada

da seguinte forma [41]:

- (i) a symplecticidade é uma propriedade que caracteriza sistemas hamiltonianos, ao passo que a conservação da energia é uma característica partilhada, também, por sistemas não hamiltonianos. Aliás, embora os integradores simplécticos não conservem, exactamente, o valor de H , eles conservam-no de forma aproximada. A «boa» conservação da energia (em termos aproximados) produzida pelos integradores simplécticos relaciona-se com a análise retrospectiva do erro, em particular, com o teorema (4.4). A ideia básica passa por mostrar que o algoritmo conserva exactamente a energia, a menos de termos exponencialmente pequenos, de um sistema hamiltoniano próximo (no entanto, se o passo temporal for demasiado grande, a energia pode apresentar um mau comportamento, mesmo no caso de os integradores serem simplécticos);
- (ii) a conservação da energia restringe a dinâmica da solução numérica, ao forçá-la a ser calculada na $(2d - 1)$ -variedade com H constante, mas não impõe nenhuma outra restrição a essa dinâmica; na $(2d - 1)$ -variedade a solução numérica é livre no seu movimento, sendo unicamente negados movimentos ortogonais à variedade. Quando d é grande, esta restrição é fraca. Mas, a symplecticidade restringe a dinâmica de uma forma mais global - todas as direcções no espaço de fases são levadas em conta.

A dicotomia integradores simplécticos-quantidade de movimento e integradores energia-quantidade de movimento só existe quando os integradores têm passo temporal constante. Pode «ter-se tudo», se forem usados algoritmos adaptativos [24], mas o preço a pagar passa pela eficiência computacional ou pela estabilidade [25].

Não sendo possível, para um passo temporal constante, obter integradores que preservem a symplecticidade e a energia, por que não optar pela conservação da energia? Embora seja possível construir tais integradores, eles exibem propriedades numéricas desinteressantes [23]. Por exemplo, em geral, são implícitos e, por isso, requerem a resolução de um sistema de equações não lineares em cada passo. Além do mais, em casos típicos, o comportamento qualitativo da solução numérica é pior do que o obtido com integradores simplécticos, mais fáceis de implementar.

Em sistemas hamiltonianos, os erros de arredondamento introduzem perturbações não hamiltonianas (dissipação), apesar do uso de integradores simplécticos. No entanto, é preferível o uso de integradores desta natureza, já que o facto dos métodos simplécticos produzirem um comportamento que «parece» hamiltoniano, mostra que as perturbações não hamiltonianas são muito mais pequenas do que as introduzidas pelos métodos não simplécticos.

Em face da relevância da symplecticidade, como construir integradores simplécticos? A literatura indica alguns caminhos, nomeadamente, o uso de funções geradoras, métodos particionados (*splitting*) e métodos variacionais. Um integrador variacional é um integrador que é a equação de Euler-Lagrange discreta, para uma dada Lagrangiana discreta. Os integradores de natureza

variacional apresentam a grande vantagem de serem simplécticos e de, adicionalmente, conservarem as funções quantidades de movimento que decorrem de simetrias na acção. Além do mais, a aproximação variacional permite a integração de sistemas conservativos, mas também de sistemas forçados, dissipativos e com restrições. A ideia subjacente à derivação dos integradores variacionais é a discretização do princípio variacional de Hamilton. No caso de sistemas conservativos, usam-se os princípios variacionais usuais na mecânica e, para sistemas dissipativos, recorre-se ao princípio de Lagrange-d'Alembert, sendo possível incorporar os efeitos dissipativos no princípio variacional. Os sistemas com restrições podem ser integrados por integradores variacionais via multiplicadores de Lagrange; a vantagem da aproximação variacional reside na não perturbação da natureza simpléctica ou conservativa dos algoritmos devido à existência de restrições [19].

Outra vantagem dos integradores variacionais é que a aproximação variacional possibilita a construção de integradores de ordem elevada, de uma maneira mais fácil e eficiente do que determinar soluções aproximadas da equação de Hamilton-Jacobi [24]. Por exemplo, pode aproximar-se directamente a acção com um grau de precisão escolhido, usando uma quadratura adequada, obtendo-se um integrador variacional de igual ordem. É também de salientar que os integradores variacionais são flexíveis, no sentido de que incluem algoritmos explícitos e implícitos. Adicionalmente, a metodologia variacional indicou o caminho para os integradores multisimplécticos, no contexto das equações diferenciais parciais. De salientar, também, o excelente comportamento dos integradores variacionais em termos do comportamento da energia, tanto no caso conservativo como no caso dissipativo. Por fim, não se ignore a *performance* dos integradores variacionais associada a quantidades estatísticas. Por exemplo, em sistemas caóticos, faz muito mais sentido determinar correctamente quantidades estatísticas do que trajectórias individuais. Neste campo, os integradores variacionais «retratam a física correctamente» [24]; por exemplo, uma quantidade estatística de interesse é a temperatura de um sistema de partículas, entidade que não está associada a nenhuma quantidade conservada mas que, no entanto, os integradores variacionais conseguem captar de forma muito interessante.

Tal como no caso contínuo, a mecânica variacional discreta tem uma abordagem lagrangiana e uma abordagem hamiltoniana; estas duas visões não se excluem, mas são complementares, fornecendo o suporte teórico necessário para a derivação de integradores que, na prática, são eficientes. Em síntese os integradores variacionais parecem ser «naturais» em contextos diversos e com resultados extremamente bons em termos práticos [32].

Na derivação dos integradores variacionais, [29] opta por construir Lagrangianas discretas que aproximam a Lagrangiana discreta exacta. A justificação avançada prende-se:

1. com a eficácia, isto é, constroem-se integradores muito práticos;
2. com razões teóricas, associadas à geometria subjacente à mecânica variacional discreta.

Neste seguimento, faz-se uma explanação sumária da mecânica variacional discreta subjacente à posterior derivação dos integradores variacionais que, por direito próprio, são integradores geométricos. Reforce-se a ideia de que, em sistemas conservativos, os integradores variacionais são simplécticos e conservam as funções quantidades de movimento [24]. A conservação das funções quantidades de movimento significa que quando o sistema discreto tem uma simetria, então existe um teorema de Noether discreto que fornece a quantidade que é exactamente conservada ao nível discreto. Uma das vantagens da aproximação variacional discreta é o facto de que o vínculo entre simetrias e quantidades conservadas é o mesmo do nível contínuo [25]; tal significa que, construindo um princípio variacional discreto com respeito a simetrias (por exemplo, invariância rotacional ou quantidade de movimento angular), então existe uma quantidade conservada que é exactamente respeitada pelo integrador. Tal não acontece com todos os métodos numéricos, mesmo que tenham uma ordem mais elevada do que o integrador variacional.

Numa fase posterior, faz-se uma breve síntese sobre os integradores que têm uma natureza geométrica, ou então, indicam-se as condições a verificar para que o sejam. Antes de iniciar a derivação das equações de Euler-Lagrange discretas, equações que definem implicitamente um algoritmo em $Q \times Q$ que aproxima o fluxo das equações de Euler-Lagrange contínuas, relembre-se os conceitos de ordem de um integrador, erro local e erro global.

Considere-se um método numérico $\psi : T^*Q \times \mathbb{R} \rightarrow T^*Q$, o qual aproxima o fluxo $\psi_H : T^*Q \times \mathbb{R} \rightarrow T^*Q$ de um dado campo vectorial hamiltoniano. Um integrador ψ de X_H diz-se de ordem r se existir um aberto $U \subset T^*Q$ e constantes $C_l > 0$ e $h_l > 0$ tais que

$$\|\psi(\mathbf{q}, \mathbf{p}, h) - \psi_H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, h)\| \leq C_l h^{r+1}, \quad (4.1)$$

para todo $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in U$ e $h \leq h_l$. A expressão que figura no lado esquerdo da inequação designa-se por erro local. Um método que tenha, pelo menos, ordem 1 diz-se consistente.

Um método ψ de X_H diz-se convergente de ordem r se existir um aberto $U \subset T^*Q$ e constantes $C_g > 0$ e $T_g > 0$ tal que

$$\|(\psi)^N(\mathbf{q}, \mathbf{p}, h) - \psi_H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, T)\| \leq C_g h^r, \quad (4.2)$$

onde $h = T/N$ para todo $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in U$, $k \leq h_g$ e $T \leq T_g$. A expressão que figura no lado esquerdo da desigualdade designa-se por erro global no tempo T .

A ordem de um integrador ψ_H de X_H pode ser calculada desenvolvendo o fluxo de ψ_H e o integrador ψ em série de Taylor em h ; se os termos coincidirem até à ordem r , o método diz-se de ordem r .

4.1 As equações de Euler-Lagrange discretas e os sistemas hamiltonianos discretos

A derivação das equações de Euler-Lagrange discretas pode ser feita conforme se segue [29]. Considerem-se, não a posição \mathbf{q} e a velocidade $\dot{\mathbf{q}}$, mas duas posições q^0 e q^1 . Seja $h \in \mathbb{R}$ o passo temporal. As posições q^0 e q^1 podem ser vistas como dois pontos numa curva, ou seja, $q^0 \approx q(0)$ e $q^1 \approx q(h)$. Neste sentido, considera-se o espaço discreto $Q \times Q$ e uma Lagrangiana discreta $L_d : Q \times Q \rightarrow \mathbb{R}$.

Considere-se, a título de exemplo, a Lagrangiana discreta $L_d(q^0, q^1, h)$, o qual aproxima a acção ao longo da curva, entre q^0 e q^1 , da forma

$$L_d(q^0, q^1, h) = h \left[\left(\frac{q^1 - q^0}{h} \right)^T M \left(\frac{q^1 - q^0}{h} \right) - V(q^0) \right],$$

onde M é a matriz das massas, de natureza simétrica definida positiva, e V um dado potencial - a expressão de L_d mostra que a aproximação a $\int_0^T L dt$, onde a Lagrangiana contínua é dado por

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} \dot{q}^T M \dot{q} - V(q), \quad (4.3)$$

foi feita usando a regra do rectângulo. Agora, considere-se a curva de pontos discreta $\{q^k\}_{k=0}^N$ e calcule-se a acção discreta ao longo desta sucessão, adicionando a Lagrangiana discreta em cada par adjacente

$$A_d = \sum_{k=0}^{N-1} L_d(q^k, q^{k+1}, h). \quad (4.4)$$

De seguida, calcula-se variações desta acção discreta, mantendo os pontos extremos, q^0 e q^N , fixos, resultando

$$\begin{aligned} \delta \sum_{k=0}^{N-1} L_d(q^k, q^{k+1}, h) &= \sum_{k=0}^{N-1} [D_1 L_d(q^k, q^{k+1}, h) \cdot \delta q^k + D_2 L_d(q^k, q^{k+1}, h) \cdot \delta q^{k+1}] \\ &= \sum_{k=1}^{N-1} [D_2 L_d(q^{k-1}, q^k, h) + D_1 L_d(q^k, q^{k+1}, h)] \cdot \delta q_k, \end{aligned}$$

onde D_i representa a derivada em ordem à i -ésima posição; usou-se a integração por partes discreta e o facto de que $\delta q^0 = \delta q^N = 0$. Impondo que as variações da acção sejam iguais a zero para qualquer escolha de δq^k , obtêm-se as equações de Euler-Lagrange discretas

$$D_2 L_d(q^{k-1}, q^k, h) + D_1 L_d(q^k, q^{k+1}, h) = 0, \quad (4.5)$$

para qualquer k . Esta equação pode ser reescrita em termos de um algoritmo discreto

$$\psi_{L_d} : Q \times Q \rightarrow Q \times Q$$

definido implicitamente por

$$D_1 L_d \circ \psi_{L_d} + D_2 L_d = 0$$

ou seja

$$\psi_{L_d}(q^{k-1}, q^k) = (q^k, q^{k+1}).$$

Tal significa que, admitindo para condições iniciais (q^0, q^1) , as equações de Euler-Lagrange discretas podem ser vistas como uma regra recursiva para calcular a sucessão $\{q^k\}_{k=0}^N$. Então, elas definem uma função $\psi_{L_d} : (q^{k-1}, q^k) \mapsto (q^k, q^{k+1})$, de forma que (4.5) podem ser perspectivadas como um integrador de passo simples para o sistema das equações de Euler-Lagrange contínuas. No caso da Lagrangiana escolhida, tem-se

$$D_2 L_d(q^{k-1}, q^k, h) = M \left(\frac{q^k - q^{k-1}}{h} \right)$$

e

$$D_1 L_d(q^k, q^{k+1}, h) = - \left[M \left(\frac{q^{k+1} - q^k}{h} \right) + h \nabla V(q^k) \right],$$

sendo as equações de Euler-Lagrange

$$M \left(\frac{q^{k+1} - 2q^k + q^{k-1}}{h^2} \right) = -\nabla V(q^k),$$

que traduzem a discretização das equações de Newton.

Um outro exemplo é dado pela Lagrangiana

$$L_d^\alpha(q^0, q^1, h) = hL \left((1 - \alpha)q^0 + \alpha q^1, \frac{q^1 - q^0}{h} \right) \quad (4.6)$$

com $0 \leq \alpha \leq 1$. Para a Lagrangiana contínua da forma (4.3), L_d^α vem

$$L_d^\alpha(q^0, q^1) = \frac{h}{2} \left(\frac{q^1 - q^0}{h} \right)^T M \left(\frac{q^1 - q^0}{h} \right) - hV((1 - \alpha)q^0 + \alpha q^1),$$

originando as seguintes equações de Euler-Lagrange

$$\frac{M}{h^2}(q^{k+1} - 2q^k + q^{k-1}) = -(1 - \alpha)\nabla V((1 - \alpha)q^k + \alpha q^{k+1}) - \alpha\nabla V((1 - \alpha)q^{k-1} + \alpha q^k). \quad (4.7)$$

Fazendo

$$a_{k+\alpha} = M^{-1}[-\nabla V((1 - \alpha)q^{k-1} + \alpha q^k)], \quad (4.8)$$

(4.7) é reescrita como

$$\frac{1}{h^2}(q^{k+1} - 2q^k + q^{k-1}) = (1 - \alpha)a_{k+1+\alpha} + \alpha a_{k+\alpha},$$

algoritmo em $Q \times Q$, implícito e de segunda ordem.

Uma expressão alternativa para a Lagrangiana discreta é dada pela versão simétrica de (4.6), definido por

$$L_d^{sim,\alpha}(q^0, q^1) = \frac{h}{2}L\left((1 - \alpha)q^0 + \alpha q^1, \frac{q^1 - q^0}{h}\right) + \frac{h}{2}L\left(\alpha q^0 + (1 - \alpha)q^1, \frac{q^1 - q^0}{h}\right), \quad (4.9)$$

onde $h \in \mathbb{R}^+$ representa o passo temporal e $\alpha \in [0, 1]$. As equações de Euler-Lagrange obtidas são simétricas e da forma

$$\frac{1}{h^2}(q^{k+1} - 2q^k + q^{k-1}) = \frac{1}{2}(1 - \alpha)a_{k+1+\alpha} + \frac{1}{2}\alpha a_{k+2-\alpha} + \frac{1}{2}\alpha a_{k+\alpha} + \frac{1}{2}(1 - \alpha)a_{k+1-\alpha}, \quad (4.10)$$

onde $a_{k+\alpha}$ é dada por (4.8), para uma Lagrangiana contínua da forma (4.3). Estas equações definem um algoritmo de segunda ordem e, para qualquer α , implícito.

A derivação das equações de Euler-Lagrange discretas apresentada pode ser sintetizada no teorema seguinte [29]. O caminho discreto é

$$C^d(Q) = \{q^d : \{t_k\}_{k=0}^N \rightarrow Q\},$$

onde $\{t_k = kh, k = 0, \dots, N\}$. O espaço tangente a C^d no ponto q^d é $T_{q^d}C^d(Q)$. \dot{Q}^d é o conjunto de pares da forma $((q^0, q^1), (q^1, q^2))$.

Teorema 4.1. *Dado uma Lagrangiana discreta de ordem $C^k, k \geq 1$, existe uma única função de ordem C^{k-1} , $D_{DEL}L_d : \dot{Q}^d \rightarrow T^*Q$, e formas-1 únicas, $\omega_{L_d}^{1+}$ e $\omega_{L_d}^{1-}$, de ordem C^{k-1} em $Q \times Q$, tais que, para todas as variações $\delta q^d \in T_{q^d}C(Q)$ de q^d ,*

$$dA_d \cdot \delta q^d$$

é dado por

$$\sum_{k=1}^{N-1} D_{DEL}L_d((q^{k-1}, q^k), (q^k, q^{k+1})) \cdot \delta q^k + \omega_{L_d}^{1+}(q^{N-1}, q^N) \cdot (\delta q^{N-1}, \delta q^N) - \omega_{L_d}^{1-}(q^0, q^1) \cdot (\delta q^0, \delta q^1). \quad (4.11)$$

A função D_{DEL} chama-se função de Euler-Lagrange discreta e a sua expressão, em coordenadas

é dada por

$$D_{DEL}L_d((q^{k-1}, q^k), (q^k, q^{k+1})) = D_2L_d(q^{k-1}, q^k) + D_1L_d(q^k, q^{k+1}).$$

As formas-1, $\omega_{L_d}^{1+}$ e $\omega_{L_d}^{1-}$, são as formas-1 lagrangianas discretas, cuja expressão, em coordenadas, é

$$\begin{aligned}\omega_{L_d}^{1+} &= D_2L_d(q^0, q^1)dq^1 = \frac{\partial L_d}{\partial (q^1)^i} (dq^1)^i, \\ \omega_{L_d}^{1-} &= -D_1L_d(q^0, q^1)dq^0 = -\frac{\partial L_d}{\partial (q^0)^i} (dq^0)^i.\end{aligned}\tag{4.12}$$

Saliente-se que, no caso discreto há duas formas-1, ao passo que no caso contínuo só há uma. No entanto, só há uma forma-2 discreta, tal como no caso contínuo, já que, por um lado,

$$dL_d = \omega_{L_d}^{1+} - \omega_{L_d}^{1-}$$

e, por outro lado,

$$d^2 = 0$$

ou seja,

$$d\omega_{L_d}^{1+} = d\omega_{L_d}^{1-}.$$

O análogo de um campo vectorial contínuo é o operador evolução discreto $X : Q \times Q \rightarrow (Q \times Q) \times (Q \times Q)$ que satisfaz $\pi \circ X = id$, onde π é o operador projecção definido por $\pi : ((q^0, q^1), ((q^0)', (q^1)')) \mapsto (q^0, q^1)$. O análogo do fluxo é a função discreta $\psi : Q \times Q \rightarrow Q \times Q$ definida por $\psi = \sigma \circ X$, onde σ é o operador translação definido por $\sigma : ((q^0, q^1), ((q^0)', (q^1)')) \mapsto ((q^0)', (q^1)')$. Reescrevendo em coordenadas, se $X : (q^0, q^1) \mapsto (q^0, q^1, (q^0)', (q^1)')$, então, $\psi : (q^0, q^1) \mapsto ((q^0)', (q^1)')$. Particularizando para um sistema lagrangiano discreto, o operador evolução lagrangiana discreta X_{L_d} satisfaz

$$D_{DEL}L_d \circ X_{L_d} = 0$$

e o análogo, em termos discretos, do fluxo é a função $\psi_{L_d} : Q \times Q \rightarrow Q \times Q$, definida como

$$\psi_{L_d} = \sigma \circ X_{L_d}.$$

Tal como no caso contínuo, X_{L_d} e ψ_{L_d} podem não estar bem definidos para escolhas arbitrárias da Lagrangiana discreta.

As equações de Euler-Lagrange discretas (4.5) podem ser deduzidas a partir da expressão (4.11); um caminho discreto $q^d \in C^d(Q)$ satisfaz as equações de Euler-Lagrange discretas se o primeiro

termo da expressão (4.11) for nulo, para todas as variações $\delta q^d \in T_{q^d}C^d(Q)$. Tal significa que os pontos $\{q^k\}$ satisfazem $\psi_{L_d}(q^{k-1}, q^k) = (q^k, q^{k+1})$.

A transformação de Legendre discreta aplica o espaço das configurações discreto $Q \times Q$ em T^*Q , através de

$$\begin{aligned} T_{L_d}^+(q^0, q^1) \cdot \delta q^1 &= D_2 L_d(q^0, q^1) \cdot \delta q^1 \\ T_{L_d}^-(q^0, q^1) \cdot \delta q^0 &= -D_1 L_d(q^0, q^1) \cdot \delta q^0, \end{aligned} \quad (4.13)$$

as quais podem ser escritas como

$$\begin{aligned} T_{L_d}^+ : (q^0, q^1) &\mapsto (q^1, p_1) = (q^1, D_2 L_d(q^0, q^1)) \\ T_{L_d}^- : (q^0, q^1) &\mapsto (q^0, p_0) = (q^0, -D_1 L_d(q^0, q^1)). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Se ambas as transformações de Legendre discretas forem isomorfismos locais, então a Lagrangiana discreta L_d diz-se regular; se forem isomorfismos globais, então L_d diz-se hiperregular. As formas-1 ω^1 lagrangiana e hamiltoniana relacionam-se pela expressão

$$\omega_{L_d}^{1\pm} = (T_{L_d}^\pm)^* \omega^1,$$

e as formas-2 ω^2 pela expressão

$$\omega_{L_d}^2 = (T_{L_d}^\pm)^* \omega^2.$$

Dado $L_d : Q \times Q \rightarrow \mathbb{R}$, o operador evolução lagrangiana discreta X_{L_d} e o análogo discreto do fluxo, ψ_{L_d} , estão bem definidos se e só se $T_{L_d}^-$ for um isomorfismo local. Também, a natureza regular de L_d é equivalente a afirmar que ψ_{L_d} está bem definida e é invertível [29].

A análoga discreta do fluxo lagrangiano, $\psi_{L_d} : Q \times Q \rightarrow Q \times Q$, quando deslocada para T^*Q , origina a função $\psi_{H_d} : T^*Q \rightarrow T^*Q$ que, de acordo com [29], tem as seguintes expressões, equivalentes entre si:

$$\begin{aligned} \psi_{H_d} &= T_{L_d}^+ \circ \psi_{L_d} \circ (T_{L_d}^+)^{-1} \\ \psi_{H_d} &= T_{L_d}^- \circ \psi_{L_d} \circ (T_{L_d}^-)^{-1} \\ \psi_{H_d} &= T_{L_d}^+ \circ (T_{L_d}^-)^{-1}. \end{aligned}$$

Em coordenadas, $\psi_{H_d} : (q^0, p_0) \mapsto (q^1, p_1)$, onde

$$\begin{aligned} p_0 &= -D_1 L_d(q^0, q^1) \\ p_1 &= D_2 L_d(q^0, q^1). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Diz-se que um integrador variacional está no seu formato posição-quantidade de movimento quando é escrito como

$$\begin{aligned} p_k &= -D_1 L_d(q^k, q^{k+1}, h) \\ p_{k+1} &= D_2 L_d(q^k, q^{k+1}, h), \end{aligned} \quad (4.16)$$

o que traduz a igualdade de quantidades de movimento entre intervalos adjacentes.

Por exemplo, fazendo a impulsão do algoritmo variacional (4.10), com a transformada de Legendre

$$T_{L_d}^{sim,\alpha}(q^0, q^1) = \left(q^1, M \left[\frac{1}{h}(q^1 - q^0) + \frac{h}{2}(\alpha a_{0+k} + (1-\alpha)a_{1-\alpha}) \right] \right),$$

obtem-se o algoritmo implícito $(q^k, p_k) \mapsto (q^{k+1}, p_{k+1})$ dado por

$$\begin{aligned} q^{k+1} &= q^k + hM^{-1}p_k + \frac{h^2}{2}[(1-\alpha)a_{k+\alpha} + \alpha a_{k+1-\alpha}] \\ p_{k+1} &= p_k + hM \left(\frac{1}{2}a_{k+\alpha} + \frac{1}{2}a_{k+1-\alpha} \right), \end{aligned} \quad (4.17)$$

algoritmo de segunda ordem, para qualquer α .

4.2 Leis de conservação em sistemas discretos

4.2.1 Conservação da forma-2 simpléctica

A função ψ_{L_d} é simpléctica, ou seja, para um único passo, tem-se que [29, 47]

$$(\psi_{L_d})^* \omega_{L_d}^2 = \omega_{L_d}^2, \quad (4.18)$$

onde $\omega_{L_d}^2 = d\omega_{L_d}^{1+} = d\omega_{L_d}^{1-}$ representa a forma-2 simpléctica discreta, dada pela expressão

$$\omega_{L_d}(q_0, q_1) = \frac{\partial^2 L_d}{\partial q_0^i \partial q_1^j} dq_0^i \wedge dq_1^j. \quad (4.19)$$

O argumento é válido para qualquer número de passos de ψ_{L_d} .

A função ψ_{H_d} preserva a impulsão da forma-2 discreta $\omega_{L_d}^2$, que corresponde à forma simpléctica canónica em T^*Q .

4.2.2 Conservação das funções quantidades de movimento

Considere-se a acção (esquerda ou direita) $\Phi : G \times Q \rightarrow Q$ de um grupo de Lie G em Q , com gerador infinitesimal ξ_Q . As funções quantidades de movimento lagrangianas discretas

$J_{L_d}^+, J_{L_d}^- : Q \times Q \rightarrow \mathfrak{g}^*$ são dadas pelas expressões

$$\begin{aligned} J_{L_d}^+(q^0, q^1) \cdot \xi &= \langle D_2 L_d(q^0, q^1), \xi_Q(q^1) \rangle, \\ J_{L_d}^-(q^0, q^1) \cdot \xi &= \langle -D_1 L_d(q^0, q^1), \xi_Q(q^0) \rangle. \end{aligned} \quad (4.20)$$

O teorema (??) tem uma versão discreta [29].

Teorema 4.2 (Teorema de Noether discreto na versão lagrangiana). *Considere-se uma Lagrangiana discreta $L_d : Q \times Q \rightarrow \mathbb{R}$, o qual é invariante sob lifts da acção (esquerda ou direita) da acção $\Phi : G \times Q \rightarrow Q$. Então, a função quantidade de movimento lagrangiana discreta $J_{L_d} : Q \times Q \rightarrow \mathfrak{g}^*$ é uma quantidade conservada pela função discreta $\psi_{L_d} : Q \times Q \rightarrow Q \times Q$, ou seja,*

$$J_{L_d} \circ \psi_{L_d} = J_{L_d}.$$

Em termos simples, tal significa que, sob o efeito de acções simétricas, a função quantidade de movimento discreta (sob a presença de acções simétricas, só existe uma única função quantidade de movimento) é preservada, ou seja, é uma constante do movimento. As funções quantidades de movimento discretas lagrangiana e hamiltoniana relacionam-se pela operação reversão

$$J_{L_d}^\pm = (T_d^\pm)^* J_H.$$

A função ψ_{H_d} preserva a impulsão das funções quantidades de movimento discretas, que correspondem às funções quantidades de movimento canónicas em T^*Q .

4.2.3 Conservação da energia

A literatura mostra que, no caso de integradores com passo temporal constante, existe uma dicotomia: ou eles conservam a simplecticidade e a quantidade de movimento, ou então conservam a energia e a quantidade de movimento. Os integradores variacionais enquadram-se no primeiro caso - são simplécticos e conservam a quantidade de movimento. No entanto, com passo temporal não constante, é possível obter integradores variacionais que preservam a simplecticidade, a energia e a quantidade de movimento [18].

Dado (q^0, q^1, h_0) , pretende-se determinar (q^1, q^2, h_1) ; em geral, tal possibilitará passar de (q^{k-1}, q^k, h_{k-1}) para (q^k, q^{k+1}, h_k) . Este procedimento difere do habitual, já que a informação sobre o passo temporal h_k está acoplada aos dados actuais (q^k, q^{k+1}) . Determinam-se h_1 e q^2 conjuntamente, por resolver uma equação similar à equação de Euler-Lagrange discreta para q^2 , ao passo que para h_1 usa-se a equação $E_d(q^0, q^1, h_0) = E_d(q^1, q^2, h_1)$, onde E_d é a função energia discreta [18].

A acção discreta é dada por

$$h_0 L_d(q^0, q^1, h_0) + h_1 L_d(q^1, q^2, h_1). \quad (4.21)$$

O algoritmo discreto é dado por

$$\frac{\partial}{\partial q^1} [h_0 L_d(q^0, q^1, h_0) + h_1 L_d(q^1, q^2, h_1)] = 0, \quad (4.22)$$

ou

$$h_0 D_2 L_d(q^0, q^1, h_0) + h_1 D_1 L_d(q^1, q^2, h_1) = 0,$$

onde os passos temporais h_0, h_1 são fixos. A energia discreta é definida por

$$E_d(q^0, q^1, h_0) = \frac{\partial}{\partial h_0} [h_0 L_d(q^0, q^1, h_0)]. \quad (4.23)$$

Por exemplo, para a Lagrangiana discreta (4.6), onde $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$ é dado pela diferença entre a energia cinética e a potencial, vem

$$E_d(q^0, q^1, h_0) = \frac{1}{2} \left(\frac{q^1 - q^0}{h_0} \right)^T M \left(\frac{q^1 - q^0}{h_0} \right) + V((1 - \alpha)q^0 + \alpha q^1).$$

O algoritmo é constituído pelas equações (4.22) e

$$E_d(q^0, q^1, h_0) = E_d(q^1, q^2, h_1). \quad (4.24)$$

Por exemplo, no caso das Lagrangianas contínuas e discretas mencionadas, a condição $E_0 = E_1$ traduz-se em

$$h_1^2 = \frac{(q^2 - q^1)^T M (q^2 - q^1)}{2[E_0 - V((1 - \alpha)q^1 + \alpha q^2)]},$$

onde a condição da energia cinética ser positiva deve ser verificada.

Este algoritmo é simpléctico, preserva a quantidade de movimento e foi desenhado de forma a conservar a energia [18].

4.3 A análise retrospectiva do erro

A ideia básica subjacente à análise retrospectiva do erro é considerar a aproximação numérica como a solução exacta de um problema modificado. Considere-se a equação diferencial

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y}) \quad (4.25)$$

e o método numérico de passo simples $\mathbf{y}_{n+1} = \Phi_h(\mathbf{y}_n)$. O objectivo da análise retrospectiva é determinar e estudar a equação diferencial modificada

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + h^2\mathbf{F}_3(\mathbf{y}) + \dots, \quad (4.26)$$

tal que o fluxo exacto $\tilde{\psi}_h(\mathbf{y})$ de (4.26) seja igual ao fluxo numérico $\Phi_h(\mathbf{y})$. A série (4.26), em geral, não converge, sendo necessário recorrer ao teorema que se segue [12].

Teorema 4.3. *Considere-se (4.25) com um campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{y})$ infinitamente diferenciável, e assumase que o método numérico admite um desenvolvimento em série de Taylor da forma*

$$\Phi_h(\mathbf{y}) = \mathbf{y} + h\mathbf{F}(\mathbf{y}) + h^2\mathbf{D}_2(\mathbf{y}) + h^3\mathbf{D}_3(\mathbf{y}) + \dots, \quad (4.27)$$

com $\mathbf{D}_j(\mathbf{y})$ suave. Então, existe um único campo vectorial $\mathbf{F}_j(\mathbf{y})$ tal que, para qualquer $N \geq 1$,

$$\Phi_h(\mathbf{y}) = \tilde{\psi}_{h,N}(\mathbf{y}) + O(h^{N+1}),$$

onde $\tilde{\psi}_{t,N}$ representa o fluxo exacto da equação modificada truncada

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + \dots + h^{N-1}\mathbf{F}_N(\mathbf{y}). \quad (4.28)$$

Este teorema é válido para $N \geq 1$, mas qual a melhor escolha de N ? O teorema seguinte lança luz sobre a resposta [13].

Teorema 4.4. *Seja $\mathbf{F}(\mathbf{y})$ analítica em $B_{2R}(\mathbf{y}_0)$ e sejam os coeficientes $\mathbf{D}_j(\mathbf{y})$ do método (4.27) analíticos em $B_R(\mathbf{y}_0)$. Admita-se que*

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{y})\| \leq M \quad e \quad \|\mathbf{D}_j(\mathbf{y})\| \leq \mu M \left(\frac{2\kappa M}{R} \right)^{j-1} \quad (4.29)$$

para todo $\mathbf{y} \in B_{2R}(\mathbf{y}_0)$ e $\mathbf{y} \in B_R(\mathbf{y}_0)$, respectivamente. Se $h \leq h_0/4$, com $h_0 = R/(e\eta M)$ e $\eta = 2 \max(\kappa, \mu/(2 \ln 2 - 1))$, então existe $N = N(h)$, nomeadamente o maior inteiro que satisfaz $hN \leq h_0$, tal que a diferença entre a solução numérica $\mathbf{y}_1 = \Phi_h(\mathbf{y}_0)$ e a solução exacta $\tilde{\psi}_{N,t}(\mathbf{y}_0)$ da equação modificada truncada (4.28) satisfaz

$$\|\Phi_h(\mathbf{y}_0) - \tilde{\psi}_{N,h}(\mathbf{y}_0)\| \leq h\gamma M e^{-h_0/h}, \quad (4.30)$$

onde $\gamma = e(2 + 1.65\eta + \mu)$ depende somente do método.

Aplicando um qualquer integrador simpléctico de ordem r a um sistema hamiltoniano, então a equação diferencial modificada é hamiltoniana com [11]

$$\tilde{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + h^r H_{r+1}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + h^{r+1} H_{r+2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \dots$$

O facto de que a aplicação de métodos simplécticos origina equações modificadas hamiltonianas é um caso particular das propriedades geométricas da análise retrospectiva do erro. Tal significa que, no contexto da equação diferencial (4.25), se \mathbf{F} pertencer a uma certa classe de campos

vectoriais (por exemplo, preservam algum integral) e o método numérico preservar esse integral, então o campo vectorial modificado também estará na mesma classe de \mathbf{F} [39].

Para os métodos de Euler simpléctico, Störmer-Verlet e Runge-Kuttas particionados é possível determinar relações de recorrência explícitas para os $H_j(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, revelando-se que eles são compostos por derivadas de $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ e, conseqüentemente, globalmente definidos.

A equação modificada truncada de um sistema hamiltoniano é

$$\tilde{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + h^r H_{r+1}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + h^{r+1} H_{r+2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \dots + h^{N-1} H_N(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (4.31)$$

A quase conservação da Hamiltoniana decorrente da aplicação de integradores simplécticos é demonstrada pela junção da expressão (4.31) e do teorema (4.4), por concluir que $\|\tilde{H}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}^n) - \tilde{H}(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}^0)\|$ é limitado em períodos de tempo exponencialmente longos [11].

4.4 Os integradores geométricos

Nesta secção consideram-se integradores considerados convencionais, indicando-se as suas propriedades geométricas, em particular, em que condições são simplécticos, e se têm natureza variacional. A importância da natureza variacional decorre de dois resultados: se o integrador é variacional, então ele preserva a 2-forma simpléctica e preserva a função quantidade de movimento [47].

Os métodos considerados são os métodos de Euler simplécticos, a regra do ponto médio implícita, a família Runge-Kutta e o método Störmer-Verlet. Em geral, a maioria dos integradores geométricos são condicionalmente estáveis. Para averiguar a estabilidade do método, escolhe-se um problema teste simples do tipo relevante, com soluções limitadas e calcula-se o limite da estabilidade para vários métodos. Em sistemas hamiltonianos, em geral, o problema teste é o oscilador harmónico com o *splitting* $T(p) + V(q)$. Por exemplo, o método Störmer-Verlet é estável para $h < 2$ e os integradores de ordem superior, com ν -etapas, são estáveis para $h < h^*$, onde em geral, $h^* \approx \pi$.

4.4.1 Os métodos de Euler simplécticos

Natureza simpléctica

Considere-se o método de Euler simpléctico da forma (3.10) que, nas variáveis \mathbf{p} e \mathbf{q} e aplicado a sistemas hamiltonianos, assume a forma

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_n - h \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_{n+1}, \mathbf{q}^n), \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_{n+1}, \mathbf{q}^n).\end{aligned}\tag{4.32}$$

Este método é implícito, já que para determinar \mathbf{p}_{n+1} é necessário resolver um sistema não linear de equações; uma vez conhecido \mathbf{p}_{n+1} , o cálculo de \mathbf{q}^{n+1} é explícito.

(4.32) é um método simpléctico de ordem 1, já que [13]

$$\left(\frac{\partial(\mathbf{p}_{n+1}, \mathbf{q}^{n+1})}{\partial(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}^n)} \right)^T J \left(\frac{\partial(\mathbf{p}_{n+1}, \mathbf{q}^{n+1})}{\partial(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}^n)} \right) = J,$$

de acordo com a definição (2.22) de simplecticidade.

O seu método adjunto

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_n - h \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}^{n+1}), \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}^{n+1})\end{aligned}\tag{4.33}$$

também é simpléctico. Pode provar-se a simplecticidade destes dois métodos recorrendo-se às formas diferenciais, nomeadamente que [23]

$$d\mathbf{q}^{n+1} \wedge d\mathbf{p}_{n+1} = d\mathbf{q}^n \wedge d\mathbf{p}_n.$$

Em sistemas hamiltonianos genéricos, ambos os métodos de Euler simplécticos são implícitos [13]. No entanto, se a Hamiltoniana for separável, isto é, da forma $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$, ambos têm natureza explícita.

Análise retrospectiva do erro

Ilustre-se esta secção com o exemplo clássico do pêndulo, com Hamiltoniana

$$H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 - \cos q,$$

e com as equações de movimento

$$\dot{p} = -\sin q, \quad \dot{q} = p.$$

Considere-se o método de Euler simplético (4.32). Desenvolvendo a solução exacta $\tilde{\psi}_h(y)$ de (4.26) em potências de h e comparando-a com o fluxo numérico, obtem-se relações de recorrência para as funções $F_j(y)$. No caso do pêndulo, resulta

$$\begin{pmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ -\sin q \end{pmatrix} + \frac{h}{2} \begin{pmatrix} -\sin q \\ p \cos q \end{pmatrix} + \frac{h^2}{12} \begin{pmatrix} 2p \cos q \\ (p^2 - 2 \cos q) \sin q \end{pmatrix} + \dots,$$

sistema com natureza hamiltoniana, com

$$\tilde{H}(p, q) = \frac{1}{2}p^2 - \cos q - \frac{h}{2}p \sin q + \frac{h^2}{12}(p^2 - \cos q) \cos q + \dots$$

Conservação de invariantes

Os métodos de Euler simpléticos preservam qualquer invariante da forma [23]

$$I = \mathbf{q}^T \mathbf{A} \mathbf{p} + \mathbf{b}^T \mathbf{z}, \quad (4.34)$$

em sistemas dinâmicos da forma $\frac{d\mathbf{z}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{z})$.

4.4.2 A regra do ponto médio implícita

A regra do ponto médio implícita é um método convergente de ordem 2, simétrico e algebricamente estável. De seguida, considera-se a sua natureza simplética e variacional e que tipo de invariante conserva.

Natureza simplética

A regra do ponto médio implícita (3.6), aplicada a sistemas hamiltonianos, é reescrita como

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + hJ^{-1}\nabla H \left(\frac{\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n}{2} \right). \quad (4.35)$$

(4.35) é um método simplético de ordem 2 [6, 13]. Diferenciando a equação (4.35), vem

$$\frac{\partial \mathbf{y}_{n+1}}{\partial \mathbf{y}} = \left(I - \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \left(\frac{\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n}{2} \right) \right)^{-1} \left(I + \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \left(\frac{\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n}{2} \right) \right), \quad (4.36)$$

e substituindo na definição de transformação simpléctica, deve verificar-se que

$$\left(I + \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \left(\frac{\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n}{2} \right) \right) J \left(I + \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \left(\frac{\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n}{2} \right) \right)^T$$

é igual a

$$\left(I - \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \left(\frac{\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n}{2} \right) \right) J \left(I - \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \left(\frac{\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n}{2} \right) \right)^T.$$

A igualdade decorre da simetria da matriz hessiana e do facto que $J^T = -J$.

Pode demonstra-se que a regra do ponto médio implícita é um integrador simpléctico recorrendo-se às formas diferenciais - aliás, como na demonstração só se exige que a matriz J seja constante, invertível e anti-simétrica, pode afirmar-se que este integrador preserva qualquer estrutura simpléctica constante [23].

Natureza variacional

Dado um sistema hamiltoniano $H : T^*Q \rightarrow \mathbb{R}$, a regra do ponto médio é um integrador $\psi_h : (q_0, p_0) \mapsto (q_1, p_1)$ com natureza variacional [29]. ψ_h é definida por

$$\frac{q_1 - q_0}{h} = \frac{\partial H}{\partial p} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{p_1 + p_0}{2} \right), \quad (4.37)$$

$$\frac{p_1 - p_0}{h} = -\frac{\partial H}{\partial q} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{p_1 + p_0}{2} \right). \quad (4.38)$$

Admita-se que H é regular, assim como a Lagrangiana correspondente, e defina-se a seguinte Lagrangiana discreta

$$L_d(q_0, q_1, h) = hL \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right). \quad (4.39)$$

Calculando p_0 e p_1 recorrendo às expressões (4.15), obtêm-se

$$p_0 = -\frac{h}{2} \frac{\partial L}{\partial q} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right),$$

$$p_1 = \frac{h}{2} \frac{\partial L}{\partial q} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right).$$

Adicionando e subtraindo estas duas equações, obtêm-se

$$\frac{p_1 + p_0}{2} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right), \quad (4.40)$$

$$\frac{p_1 - p_0}{h} = \frac{\partial L}{\partial q} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right). \quad (4.41)$$

Apelando à transformação de Legendre, pode dizer-se que a equação (4.40) significa

$$T_L \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right) = \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{p_1 + p_0}{2} \right),$$

e então, por um lado, como $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}}$, a equação (4.41) corresponde à equação (4.38) e, por outro lado, a mesma equação (4.41), conjugada com a igualdade $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = \dot{\mathbf{q}}$, origina (4.37).

Por fim, note-se que a Lagrangiana (4.39) é um caso particular da Lagrangiana (4.6)

$$L_d^\alpha(q_0, q_1, h) = hL \left((1 - \alpha)q_0 + \alpha q_1, \frac{q_1 - q_0}{h} \right),$$

onde $\alpha \in [0, 1]$. Para qualquer valor de α , obtêm-se sempre integradores implícitos. Quando $\alpha = \frac{1}{2}$, obtêm-se a Lagrangiana (4.39), único valor de α para o qual L_d é simétrica e de segunda ordem. Para outros valores de α , obtêm-se integradores de ordem 1.

A regra do ponto médio também pode ser obtida por intermédio da Lagrangiana discreta (4.9), ou seja, $L_d = L_d^{sim, \alpha}$, para $\alpha = \frac{1}{2}$ [19]. O algoritmo (4.17), para esta escolha de α , pode ser escrito como

$$\frac{1}{h} \begin{pmatrix} q^{k+1} - q^k \\ p_{k+1} - p_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M^{-1} \left(\frac{p_{k+1} + p_k}{2} \right) \\ -\nabla V \left(\frac{q^{k+1} + q^k}{2} \right) \end{pmatrix},$$

o qual, para $\mathbf{z} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$, tem a representação $\frac{z_{k+1} - z_k}{h} = X_H \left(\frac{z_{k+1} + z_k}{2} \right)$, onde X_H é o campo vectorial hamiltoniano correspondente à Hamiltoniana $H = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T M^{-1} \mathbf{p} + V(\mathbf{q})$.

Se, em vez de avaliar a força no ponto médio, se fizer a média das forças, obtêm-se, para $\alpha \in [0, 1]$, a regra trapezoidal generalizada

$$L_d^{trap, \alpha}(q_0, q_1, h) = h(1 - \alpha)L \left(q_0, \frac{q_1 - q_0}{h} \right) + h\alpha L \left(q_1, \frac{q_1 - q_0}{h} \right). \quad (4.42)$$

Este método é explícito para todo o α e de ordem 1, excepto quando $\alpha = \frac{1}{2}$, sendo neste caso de ordem 2 e simétrico.

Conservação de invariantes

A regra do ponto médio implícita preserva exactamente qualquer invariante quadrático da forma [23]

$$I = \frac{\mathbf{z}^T A \mathbf{z}}{2} + \mathbf{b}^T \mathbf{z}, \quad (4.43)$$

onde A representa uma matriz simétrica, para a equação diferencial $\frac{d\mathbf{z}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{z})$. Tal significa que o integrador conserva exactamente a quantidade de movimento linear e a quantidade de movimento angular de um sistema hamiltoniano linear.

4.4.3 Métodos Runge-Kutta simplécticos

Natureza simpléctica

Em geral, os métodos Runge-Kutta não são ideais para integrar sistemas hamiltonianos, já que estes não são estruturalmente estáveis relativamente a perturbações não hamiltonianas [7]. A aproximação numérica feita por métodos Runge-Kutta convencionais introduz perturbações não hamiltonianas, o que significa que o sistema, originalmente hamiltoniano, tornar-se-á dissipativo (não hamiltoniano), com um comportamento no longo prazo completamente diferente - por exemplo, os sistemas dissipativos têm atractores e os hamiltonianos não. Por este motivo, faz todo o sentido usar métodos da família Runge-Kutta que preservem as características dos sistemas hamiltonianos, nomeadamente, que cada passo na integração seja uma transformação canónica ou simpléctica.

Métodos Runge-Kutta explícitos e simplécticos são usados no caso de Hamiltonianas separáveis e os implícitos para as não separáveis. Os métodos Runge-Kutta Gauss-Legendre são os mais adequados para sistemas hamiltonianos gerais porque, embora sejam implícitos e, por isso, de implementação mais pesada [14, 31]:

- (i) são A-estáveis, ou seja, são estáveis para todo o passo temporal h e para todos os sistemas lineares com soluções limitadas;
- (ii) têm a máxima ordem possível em métodos Runge-Kutta com ν -etapas, ordem 2ν ;
- (iii) preservam todos os primeiros integrais quadráticos;
- (iv) são simplécticos para sistemas hamiltonianos canónicos.

Embora os métodos simplécticos sejam preferíveis na integração de sistemas hamiltonianos, note-se que eles não são perfeitos; por exemplo, mesmo implementando um Gauss-Legendre na integração de sistemas hamiltonianos, não se consegue a conservação da energia. No entanto,

na maioria das aplicações, opta-se pela preservação da estrutura hamiltoniana, ao invés da conservação da energia.

Considere-se o método Runge-Kutta com tabela

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & A \\ \hline & \mathbf{b}^T \end{array}$$

Aplicando-o ao sistema hamiltoniano (2.7), obtêm-se as equações

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_i &= \mathbf{p}_n + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}^j, t_n + c_j h) \\ \mathbf{Q}^i &= \mathbf{q}^n + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \mathbf{g}(\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}^j, t_n + c_j h) \\ \mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_n + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{f}(\mathbf{P}_i, \mathbf{Q}^i, t_n + c_i) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{g}(\mathbf{P}_i, \mathbf{Q}^i, t_n + c_i h), \end{aligned} \tag{4.44}$$

onde \mathbf{f} e \mathbf{g} representam, respectivamente, os d -vectors com componentes $-\partial H/\partial q^i$ e $\partial H/\partial p_i$; \mathbf{P}_i e \mathbf{Q}^i são as etapas intermédias correspondentes às variáveis \mathbf{p} e \mathbf{q} , respectivamente. Demonstra o teorema seguinte [41].

Teorema 4.5. *Se os coeficientes de um método Runge-Kutta verificarem as relações*

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad i, j = 1, \dots, \nu, \tag{4.45}$$

então o método é simplético.

Um exemplo de métodos Runge-Kutta simpléticos são os de Gauss-Legendre. Todos os métodos Runge-Kutta simpléticos são implícitos, o que decorre de fazer $i = j$ em (4.45) e exigir a consistência do método.

Devido à simetria, a validade de (4.45) é garantida se for verificada para $i \leq j$. No entanto, não existe nenhuma relação entre a simetria e a symplecticidade de um método Runge-Kutta. Por exemplo, a regra do ponto médio (3.6) é simétrica e simplética; o método de Euler explícito não é nem simétrico nem simplético. É possível construir algoritmos de 2 etapas simétricos mas não simpléticos ou, então, simpléticos mas não simétricos.

Leis de conservação

O teorema (2.2) mostra que, em problemas hamiltonianos autónomos, a Hamiltoniana é uma quantidade conservada. Será que os métodos Runge-Kutta também conservam a Hamiltoniana? Ou, em termos mais abrangentes, se I for uma quantidade conservada por um sistema hamiltoniano autónomo, será que I também é conservada por métodos desta natureza? Todos os métodos Runge-Kutta conservam invariantes lineares [13]. Quando I é quadrático, utiliza-se o resultado seguinte [41].

Teorema 4.6. *Admita-se que $I(\mathbf{y}) = \frac{1}{2}\mathbf{y}^T S \mathbf{y}$, onde S é uma matriz simétrica constante, é uma quantidade conservada por um sistema autónomo $\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{y}, t)$, não necessariamente hamiltoniano. Então, I também é conservado quando o sistema é integrado por um método Runge-Kutta simplético, ou seja, $I(\mathbf{y}) = \frac{1}{2}\mathbf{y}^{nT} S \mathbf{y}^n$ não varia com n .*

Este teorema 4.6 implica que, se um sistema autónomo linear com Hamiltoniana quadrática for integrado por um método Runge-Kutta simplético, então H será exactamente conservado ao longo das trajectórias numéricas.

Os integrais lineares e quadráticos são preservados pelos métodos Runge-Kutta simpléticos [32]. No entanto, por exemplo, para preservar um integral cúbico, tem de se fazer a escolha entre a preservação da estrutura simplética e a preservação do integral.

Simetria

Em que situação é que os métodos Runge-Kutta são simétricos? Demonstra-se o teorema que se segue [13, 32].

Teorema 4.7. *O método adjunto de um método Runge-Kutta com ν -etapas,*

$$\begin{aligned} k_i &= f \left(t_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} k_j \right), \quad i = 1, \dots, \nu \\ y_1 &= y_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i k_i, \end{aligned} \quad (4.46)$$

é ainda um método Runge-Kutta de ν -etapas. Os seus coeficientes são dados por

$$a_{ij}^* = b_{\nu+1-j} - a_{\nu+1-i, \nu+1-j}, \quad b_i^* = b_{\nu+1-i}. \quad (4.47)$$

Se

$$a_{\nu+1-i, \nu+1-j} + a_{ij} = b_j, \quad (4.48)$$

para todo o i, j , então o método Runge-Kutta (4.46) é simétrico.

c_1	a_{11}				
c_2	b_1	a_{22}			
c_3	b_1	b_2	a_{33}		
$1 - c_2$	b_1	b_2	b_3	a_{44}	
$1 - c_1$	b_1	b_2	b_3	b_2	a_{55}
	b_1	b_2	b_3	b_2	b_1

Tabela 4.1: Método Runge-Kutta implícito diagonal de ordem 5

Nenhum método Runge-Kutta explícito pode ser simétrico, pois, para $i = j$, não satisfazem a equação (4.48). Nos métodos Runge-Kutta implícitos diagonais, onde $a_{ij} = 0$ para $i < j$ e elementos da diagonal não nulos, a condição (4.48) vem

$$a_{ij} = b_j = b_{\nu+1-j} \quad \text{para } i > j, \quad a_{jj} + a_{\nu+1-j, \nu+1-j} = b_j.$$

Por exemplo, para $\nu = 5$, a tabela de tal método é da forma desenhada na tabela 4.1, com $a_{33} = \frac{b_3}{2}$, $a_{44} = b_2 - a_{22}$ e $a_{55} = b_1 - a_{11}$.

4.4.4 Métodos Runge-Kutta particionados

Natureza simpléctica

Considere-se uma Hamiltoniana do tipo

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}), \quad (4.49)$$

designado por Hamiltoniana separável. Neste caso, as equações de Hamilton assumem a forma particionada (3.36), com

$$\mathbf{f} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}, \quad \mathbf{g} = \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}},$$

sendo, então, possível integrá-las por um método Runge-Kutta particionado.

Prova-se o teorema que se segue [41].

Teorema 4.8. *Se os coeficientes de um método Runge-Kutta particionado verificarem as relações*

$$b_i A_{ij} + B_j a_{ji} - b_i B_j = 0, \quad i, j = 1, \dots, \nu, \quad (4.50)$$

então o método, quando aplicado a um problema hamiltoniano com Hamiltoniana separável (4.49), é simpléctico.

No caso mais geral das equações (3.30), deve acrescentar-se a equação [13]

$$b_i = B_i, \quad \forall i.$$

Natureza variacional

Considere-se o método Runge-Kutta particionado

$$\begin{aligned} p_1 &= p_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} B_i \dot{P}_i \\ q^1 &= q^0 + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \dot{Q}^i \\ P_1 &= p_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} \dot{P}_j \\ Q^i &= q^0 + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \dot{Q}^j, \end{aligned} \tag{4.51}$$

onde $\dot{P}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(P_i, Q^i)$, $\dot{Q}^i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(P_i, Q^i)$, com Hamiltoniana $H = \mathbf{p}^T \dot{\mathbf{q}} - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$. Se o método for simplético, então é válido o teorema que se segue [13, 29].

Teorema 4.9. *O integrador variacional com Lagrangiana discreta*

$$L_h(q^0, q^1) = h \sum_{i=1}^{\nu} b_i L(Q^i, \dot{Q}^i) \tag{4.52}$$

é equivalente ao método Runge-Kutta particionado simplético, aplicado ao sistema hamiltoniano com $H = \mathbf{p}^T \dot{\mathbf{q}} - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$.

Leis de conservação

Os métodos Runge-Kutta particionados conservam invariantes lineares se $b_i = B_i$, para todo o i , ou se o invariante depende somente de \mathbf{p} ou de \mathbf{q} [13].

O análogo do teorema 4.6 para métodos Runge-Kutta particionados assume a forma seguinte.

Teorema 4.10. *Admita-se que $I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T S \mathbf{q}$, onde S é uma matriz constante, é uma quantidade conservada de um sistema autónomo particionado (3.36), não necessariamente hamiltoniano. Então, I também é uma quantidade conservada quando o sistema é integrado por um método Runge-Kutta particionado simplético, ou seja, $I(\mathbf{p}^n, \mathbf{q}^n)$ não varia com n .*

No caso dos métodos Runge-Kutta particionados simpléticos, mesmo que se assuma a

linearidade do sistema a integrar, tal não significa, em geral, a conservação da Hamiltoniana: $I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T S \mathbf{q}$ não é a expressão quadrática mais geral nas variáveis \mathbf{p} e \mathbf{q} .

Simetria

Admita-se que se aplica um método Runge-Kutta particionado ao sistema

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{z}), \quad \dot{\mathbf{z}} = \mathbf{g}(\mathbf{y}, \mathbf{z}).$$

O método só será simétrico se ambos os métodos Runge-Kutta o forem [13].

Teorema 4.11. *Se os coeficientes de ambos os métodos Runge-Kutta, b_i, a_{ij} e B_i, A_{ij} satisfizerem a condição (4.48), então o método*

$$\begin{aligned} k_i &= f \left(y_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} k_j, z_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} l_j \right) \\ l_i &= g \left(y_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} k_j, z_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} l_j \right) \\ y_1 &= y_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i k_i \\ z_1 &= z_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} B_i l_i \end{aligned}$$

é simétrico.

Os métodos de Runge-Kutta particionados mais úteis, no contexto da integração geométrica, são o par Lobatto IIIA-IIIIB, métodos de ordem $2\nu - 2$, já que são simpléticos em sistemas hamiltonianos.

4.4.5 Métodos Runge-Kutta-Nyström

Formulação

Se a Hamiltoniana for separável com $T = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T M^{-1} \mathbf{p}$, com M uma matriz constante, simétrica e invertível, H é dada pela expressão

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T M^{-1} \mathbf{p} + V(\mathbf{q}). \quad (4.53)$$

Note-se que a Hamiltoniana pode ser separável, mas não da forma (4.53) - por exemplo, o movimento relativista de um sistema de pontos de massa. No caso (4.53), as equações do movimento são

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{f}(\mathbf{q}) = \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}, \quad \dot{\mathbf{q}} = M^{-1}\mathbf{p}, \quad (4.54)$$

ou, eliminando \mathbf{p}

$$\ddot{\mathbf{q}} = M^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{q}),$$

sistema que pode ser integrado por um método Runge-Kutta particionado. Reescrevendo as equações (3.35) em termos das variáveis \mathbf{p} e \mathbf{q} , obtém-se a seguinte expressão para as várias etapas

$$\mathbf{Q}^i = \mathbf{q}^n + h\gamma_i M^{-1}\mathbf{p}_n + h^2 \sum_{j=1}^{\nu} \alpha_{ij} M^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{Q}^j, t_n + \gamma_j h); \quad (4.55)$$

sendo as aproximações são dadas por

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_n + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{f}(\mathbf{Q}^i, t_n + \gamma_i h) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h M^{-1}\mathbf{p}_n + h^2 \sum_{i=1}^{\nu} \beta_i M^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{Q}^i, t_n + \gamma_i h). \end{aligned} \quad (4.56)$$

Natureza variacional

Os métodos de Runge-Kutta explícitos particionados simpléticos são variacionais, pelo menos para Hamiltonianas cuja energia cinética é da forma $T = \frac{1}{2}\mathbf{p}^T M^{-1}\mathbf{p}$, para alguma matriz de massa M constante [29].

Natureza simplética

As condições para que um método de Runge-Kutta-Nyström seja simplético são referidas no teorema seguinte.

Teorema 4.12. *Admita-se que os coeficientes (3.33) do método de Runge-Kutta-Nyström satisfazem*

$$\begin{aligned} \beta_i &= b_i(1 - \gamma_i), & i &= 1, \dots, \nu, \\ b_i(\beta_j - \alpha_{ij}) &= b_j(\beta_i - \alpha_{ji}), & i, j &= 1, \dots, \nu. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Então, o método, quando aplicado a problemas hamiltonianos com Hamiltoniana da forma (4.53) é simplético.

Leis de conservação

O teorema análogo ao teorema (4.10) é o seguinte.

Teorema 4.13. *Admita-se que $I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T S \mathbf{q}$, onde S é uma matriz constante, é uma quantidade conservada de um sistema autónomo particionado (3.36), não necessariamente hamiltoniano. Então, I também é uma quantidade conservada quando o sistema é integrado por um método Runge-Kutta Nyström simplético, ou seja, $I(\mathbf{p}^n, \mathbf{q}^n)$ não varia com n .*

Analogamente aos métodos Runge-Kutta particionados simpléticos, o facto de o sistema a integrar ser linear não significa, necessariamente, a conservação de H pelo método Runge-Kutta-Nyström, já que a expressão $I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T S \mathbf{q}$ não é a função quadrática mais geral, nas variáveis \mathbf{p} e \mathbf{q} .

4.4.6 O método Störmer-Verlet

Natureza variacional

O método Störmer-Verlet é um método variacional [26, 29]. Admita-se que a Lagrangiana do sistema é dado pela diferença entre a energia cinética e a energia potencial

$$L(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}^T M \dot{\mathbf{q}} - V(\mathbf{q}), \quad (4.58)$$

onde M é a matriz das massas, de natureza definida positiva. Se M não depender de \mathbf{q} , as equações de Euler-Lagrange (2.4) reduzem-se à equação diferencial de segunda ordem

$$M \ddot{\mathbf{q}} = -\nabla V(\mathbf{q}).$$

Se, no processo de discretização, a aproximação a $\int_{t_0}^{t_N} L dt$ for feita pela regra trapezoidal (3.5),

$$L_h(q_n, q_{n+1}) = \frac{h}{2} L \left(q_n, \frac{q_{n+1} - q_n}{h} \right) + \frac{h}{2} L \left(q_{n+1}, \frac{q_{n+1} - q_n}{h} \right) \quad (4.59)$$

obtêm-se as equações de Euler-Lagrange discretas

$$M(q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1}) + h^2 \nabla V(q_n) = 0, \quad (4.60)$$

expressão análoga a (3.40), para $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = -M^{-1} \nabla V(\mathbf{q})$.

Propriedades geométricas

Nesta subsecção sumarizam-se as propriedades do fluxo das equações diferenciais que são preservadas pelo método Störmer-Verlet, nomeadamente, reversibilidade, symplecticidade e preservação do volume.

1. *Simetria e reversibilidade.* O método Störmer-Verlet, quando aplicado à equação diferencial de segunda ordem (3.39), é simétrico e reversível [12].

- *Simetria.* O método Störmer-Verlet é simétrico com respeito à direcção temporal: se, nas equações (3.43), se substituir h por $-h$ e se trocar n por $n + 1$, obtém-se o mesmo método; analogamente nas equações (3.44), para as substituições $h \leftrightarrow -h$ e $n - \frac{1}{2} \leftrightarrow n + \frac{1}{2}$. Tal significa que, em termos da formulação de passo simples $\Phi_h : (\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_n) \mapsto (\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+1})$,

$$\Phi_h = \Phi_{-h}^{-1} \quad (4.61)$$

- *Reversibilidade.* A simetria temporal do método Störmer-Verlet implica a reversibilidade. Se, no sistema (3.41), se inverter a direcção da velocidade inicial, então a trajectória solução é a mesma, mas a direcção do movimento é contrária. Neste sentido, diz-se que o fluxo ψ_t satisfaz

$$\psi_t(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\widehat{\mathbf{q}}, \widehat{\mathbf{v}}) \quad \text{implica} \quad \psi_t(\widehat{\mathbf{q}}, -\widehat{\mathbf{v}}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v}), \quad (4.62)$$

ou seja, o fluxo é reversível com respeito à reflexão $\rho : (\mathbf{q}, \mathbf{v}) \mapsto (\mathbf{q}, -\mathbf{v})$. O método Störmer-Verlet é reversível, ou seja, satisfaz

$$\Phi_h(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\widehat{\mathbf{q}}, \widehat{\mathbf{v}}) \quad \text{implica} \quad \Phi_h(\widehat{\mathbf{q}}, -\widehat{\mathbf{v}}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v}). \quad (4.63)$$

Mostra-se que a simetria deste método é equivalente à sua reversibilidade [12]. Em alguns casos, o fluxo é ρ -reversível com respeito a involuções ρ , isto é

$$\rho \circ \psi_t = \psi_t^{-1} \circ \rho. \quad (4.64)$$

Genericamente, o fluxo de uma equação diferencial $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y})$ é ρ -reversível se e só se o campo vectorial satisfaz $\rho \circ \mathbf{F} = -\mathbf{F} \circ \rho$; neste caso, a equação diferencial diz-se ρ -reversível. O método Störmer-Verlet é ρ -reversível para ρ da forma $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\rho_1(\mathbf{q}), \rho_2(\mathbf{v}))$, ou seja,

$$\rho \circ \Phi_h = \Phi_h^{-1} \circ \rho. \quad (4.65)$$

2. *Sistemas hamiltonianos e symplecticidade.* Considere-se o sistema genérico

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{g}(\mathbf{q}, \mathbf{v}), \quad \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{f}(\mathbf{q}, \mathbf{v}). \quad (4.66)$$

Usando as equações (3.46) e (3.47) obtém-se uma extensão do método de Störmer-Verlet com o seguinte formato

$$\begin{aligned} v_{n+\frac{1}{2}} &= v_n + \frac{h}{2} f\left(q_n, v_{n+\frac{1}{2}}\right) \\ q_{n+1} &= q_n + \frac{h}{2} \left(g\left(q_n, v_{n+\frac{1}{2}}\right) + g\left(q_{n+1}, v_{n+\frac{1}{2}}\right) \right) \\ v_{n+1} &= v_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} f\left(q_{n+1}, v_{n+\frac{1}{2}}\right). \end{aligned} \quad (4.67)$$

O método Störmer-Verlet (4.67) aplicado ao sistema de equações hamiltonianas (2.7) assume a forma

$$\begin{aligned} p_{n+\frac{1}{2}} &= p_n - \frac{h}{2} \frac{\partial H}{\partial q}\left(p_{n+\frac{1}{2}}, q_n\right) \\ q_{n+1} &= q_n + \frac{h}{2} \left(\frac{\partial H}{\partial p}\left(p_{n+\frac{1}{2}}, q_n\right) + \frac{\partial H}{\partial p}\left(p_{n+\frac{1}{2}}, q_{n+1}\right) \right) \\ p_{n+1} &= p_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2} \frac{\partial H}{\partial q}\left(p_{n+\frac{1}{2}}, q_{n+1}\right). \end{aligned} \quad (4.68)$$

No caso particular da Hamiltoniana ter a expressão

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T M^{-1} \mathbf{p} + V(\mathbf{q}), \quad (4.69)$$

onde M é a matriz das massas, com natureza definida positiva e $V(\mathbf{q})$ é o potencial, as equações (4.68) reduzem-se ao método Störmer-Verlet (3.43), com $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = -M^{-1} \nabla V(\mathbf{q})$, e fazendo $p_n = Mv_n$.

A demonstração da symplecticidade do método Störmer-Verlet pode ser diversa, dependendo da interpretação dada ao método: visão do Störmer-Verlet como a composição dos métodos de Euler, ou como um método particionado, ou como um integrador variacional, ou então por apelar às funções geradoras [12]. O método Störmer-Verlet é simplético e de ordem 2; a demonstração apela à equação (3.49) e ao facto de as transformações simpléticas serem um grupo, em particular que, a composição de transformações simpléticas é, também, simplética [13].

3. *Preservação do volume.* O método (4.68) aplicado ao sistema (2.7) preserva o volume, consequência da symplecticidade; de facto, a equação (2.22), definição de transformação simplética, implica

$$\det \psi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = 1,$$

para todo o (\mathbf{p}, \mathbf{q}) .

Conservação dos invariantes

Uma função $I(\mathbf{y})$ diz-se um invariante (ou uma quantidade conservada, ou uma constante do movimento, ou um integral primeiro) da equação diferencial $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y})$ se $I(\mathbf{y}(t))$ for constante ao longo de toda a solução, ou de forma equivalente,

$$I'(\mathbf{y})\mathbf{F}(\mathbf{y}) = 0, \quad \text{para todo o } \mathbf{y}, \quad (4.70)$$

o que significa que o gradiente $\nabla I(\mathbf{y})$ é ortogonal ao campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{y})$, em todo o ponto do espaço de fase. Os teoremas (4.14) e (4.15) indicam que tipos de invariantes são preservados pelo método Störmer-Verlet [12].

Teorema 4.14. *O método Störmer-Verlet preserva os integrais primeiros lineares.*

Muitos integrais primeiros originam-se no teorema de Noether. Nas condições do teorema de Noether, os integrais primeiros assumem a forma $\mathbf{p}^T a(\mathbf{q})$ [1]; infere-se, então, que em sistemas hamiltonianos da forma

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^T M^{-1}\mathbf{p} + V(\mathbf{q}) \quad (4.71)$$

com Lagrangiana associada da forma

$$L(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \frac{1}{2}\mathbf{v}^T M\mathbf{v} - V(\mathbf{q}),$$

$a(\mathbf{q})$ deve ser linear. Consequentemente, para sistemas hamiltonianos (2.7) com Hamiltoniana (4.71), todos os integrais primeiros que se originam a partir do teorema de Noether são preservados pelo método de Störmer-Verlet.

Mas, em geral, os integrais primeiros quadráticos já não são preservados pelo método, embora uma subclasse o seja.

Teorema 4.15. *O método Störmer-Verlet preserva os integrais primeiros quadráticos da forma*

$$I(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{v}^T (C\mathbf{q} + \mathbf{c})$$

ou

$$I(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{p}^T (B\mathbf{q} + \mathbf{b})$$

no caso hamiltoniano.

O teorema (4.15) pode ser utilizado para provar, de forma alternativa, a symplecticidade do método Störmer-Verlet [12].

Equação modificada do método Störmer-Verlet

Fazendo $\mathbf{y} = (q, v)^T$ e $\mathbf{F}(\mathbf{y}) = (v, f(q))^T$, a equação diferencial (3.41) assume a forma de (4.25). Para o método Störmer-Verlet (3.43), tem-se

$$\Phi_h(q, v) = \begin{pmatrix} q + hv + \frac{h^2}{2}f(q) \\ v + \frac{h}{2}f(q) + \frac{h}{2}f(q + hv + \frac{h^2}{2}f(q)) \end{pmatrix}. \quad (4.72)$$

Desenvolvendo esta função em série de Taylor, obtém-se (4.27), com

$$\mathbf{D}_2(q, v) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} f(q) \\ f'(q)v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_3(q, v) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ f'(q)f(q) + f''(q)(v, v) \end{pmatrix}, \dots$$

sendo as funções $\mathbf{F}_j(q, v)$ construídas pelas relações de recorrência [12]

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_2(\mathbf{y}) &= \mathbf{D}_2(\mathbf{y}) - \frac{1}{2!}\mathbf{F}'\mathbf{F}(\mathbf{y}) \\ \mathbf{F}_3(\mathbf{y}) &= \mathbf{D}_3(\mathbf{y}) - \frac{1}{3!}(\mathbf{F}''(\mathbf{F}, \mathbf{F})(\mathbf{y}) + \mathbf{F}'\mathbf{F}'\mathbf{F}(\mathbf{y})) - \frac{1}{2!}(\mathbf{F}'\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + \mathbf{F}'_2\mathbf{F}(\mathbf{y})), \end{aligned} \quad (4.73)$$

as quais definem, univocamente, as funções $\mathbf{F}_j(\mathbf{y})$. Estas expressões são consequência da comparação, em potências de h , das expressões (4.27) e (4.74)

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_h(\mathbf{y}) &= \mathbf{y} + h(\mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + h^2\mathbf{F}_3(\mathbf{y}) + \dots) \\ &\quad + \frac{h^2}{2!}(\mathbf{F}'(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}'_2(\mathbf{y}) + \dots)(\mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + \dots) + \dots \end{aligned} \quad (4.74)$$

Como o método Störmer-Verlet é de ordem 2, a função $\mathbf{D}_2(q, v)$ tem de coincidir com o coeficiente h^2 da solução exacta, e então, resulta $\mathbf{F}_2(q, v) = 0$. Aliás, demonstra-se que para métodos simétricos, a equação diferencial modificada admite uma expansão em potências ímpares de h , ou seja, [12]

$$\mathbf{F}_{2j}(\mathbf{y}) = 0, \quad j = 1, 2, \dots$$

Para $\mathbf{F}_3(q, v)$ obtém-se

$$\mathbf{F}_3(q, v) = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} -2f'(q)v \\ f'(q)f(q) + f''(q)(v, v) \end{pmatrix}. \quad (4.75)$$

Para funções $\mathbf{F}_j(q, v)$ ímpares de ordem superior, as expressões são mais pesadas e com derivadas de $f(q)$ de ordem mais elevada.

Propriedades da equação diferencial modificada

As propriedades geométricas de um método numérico têm a sua contrapartida na equação modificada. Assim, estudar as propriedades de determinado método, é equivalente a estudar as propriedades correspondentes da equação diferencial modificada. Em particular para o método Störmer-Verlet, mostra-se que [13]:

- (i) *Sistemas reversíveis.* Se o método Störmer-Verlet (3.43) for aplicado a (3.41), então, cada truncatura da equação diferencial modificada é reversível com respeito à reflexão $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v})$.
- (ii) *Sistemas hamiltonianos.* Se o método Störmer-Verlet (4.68) for aplicado a um sistema hamiltoniano, então cada truncatura da equação diferencial modificada é hamiltoniana.
- (iii) *Integrais primeiros.* Se o método Störmer-Verlet (4.67) for aplicado a uma equação diferencial com um integral primeiro da forma $I(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{v}^T(C\mathbf{q} + \mathbf{c})$, então, cada truncatura da equação diferencial modificada tem $I(\mathbf{q}, \mathbf{v})$ para integral primeiro.

Comportamento assintótico das soluções numéricas

A energia total $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ de um sistema hamiltoniano não é exactamente preservada pelo método Störmer-Verlet; no entanto, a energia é conservada de forma aproximada. De facto, em sistemas hamiltonianos genéricos, a Hamiltoniana é preservada, no longo prazo, de forma aproximada.

Teorema 4.16. *A energia total ao longo da solução numérica (p_n, q_n) do método Störmer-Verlet satisfaz*

$$|H(p_n, q_n) - H(p_0, q_0)| \leq Ch^2 + C_N h^N t, \quad \text{para } 0 \leq t = nh \leq h^{-N},$$

para N inteiro positivo arbitrário. As constantes C e C_N são independentes de t e h . C_N depende dos valores extremos das derivadas de H até à ordem $N + 1$ na região que contém os valores das soluções numéricas.

O teorema é demonstrado de duas formas diferentes [12]; numa delas apela-se à symplecticidade do método Störmer-Verlet, conjugando-a com a análise retrospectiva e, na outra, apela-se à simetria do método, conjugando-a com a análise retrospectiva. O contributo da análise retrospectiva do erro é visível em muitas demonstrações no campo da integração geométrica.

Os resultados obtidos com o método Störmer-Verlet aplicado a problemas com Hamiltoniana separável são válidos para a implementação do mesmo método em problemas com Hamiltonianas não separáveis [12].

4.5 Passo de integração adaptativo

Durante a integração de sistemas de equações diferenciais não lineares, mudanças no carácter das soluções podem exigir mudanças no passo de integração. Ilustre-se este ponto com o problema de Kepler, que embora seja integrável, serve de exemplo em fins meramente académicos. A primeira lei de Kepler - problema dos 2 corpos - menciona que um corpo sujeito a forças gravitacionais move-se ao longo de uma elipse, com o corpo fixo num dos focos. A força que actua no corpo móvel é inversamente proporcional ao quadrado da distância dos dois corpos. Então, quando as órbitas estão numa elipse com uma excentricidade elevada, tais como os cometas no sistema solar, a magnitude da força ao longo da órbita varia consideravelmente. Por este motivo, é evidente que a dinâmica do corpo móvel na vizinhança do corpo fixo deve ser integrada de forma muito precisa, o que significa que o uso de um passo de integração variável é aconselhável e, até mesmo, essencial.

O procedimento clássico de implementação de métodos numéricos com passo de integração variável ou adaptativo é baseado na escolha de um passo de forma a que o erro estimado produzido esteja abaixo de um tolerância definida previamente (é vulgar o uso de estimativas do erro local. Por exemplo, na integração de sistemas de equações diferenciais pelo método Runge-Kutta, é usual adicionar um estágio adicional ao método, de forma a produzir uma aproximação de ordem superior; a diferença entre as duas aproximações é usada como uma estimativa do erro.

Os métodos numéricos simplécticos com passo de integração fixo que integram sistemas hamiltonianos demonstram propriedades bastantes interessantes numa integração de longo prazo. No entanto, todo o comportamento qualitativo reproduzido correctamente pelo método numérico pode ser perdido no caso da implementação clássica de passo adaptativo. Não se pode esperar que uma combinação cega de integradores simplécticos com integradores com controlo automático do passo de integração originem resultados numéricos melhores [10, 13, 23].

De facto, existe evidência numérica que mostra que, quando os integradores simplécticos são implementados com passo de integração adaptativo, eles perdem as suas propriedades na integração de longo prazo, já não sendo superiores aos integradores clássicos não simplécticos [9]. A razão da fraca prestação dos integradores simplécticos com passo de integração variável está intimamente associada à análise retrospectiva do erro. Para se construir uma expansão da Hamiltoniana perturbada de um método numérico, é necessário assumir que as transformações simplécticas usadas são idênticas em cada passo de integração. Se o passo de integração varia, surge o problema de estar a gerar aproximações a um, e depois a outro e outro sistema hamiltoniano perturbado, à medida que o passo de integração varia [13, 23].

Em meados dos anos 90 do século transacto, o desenvolvimento de integradores simplécticos adaptativos que retivessem o comportamento de longo prazo dos integradores simplécticos com passo de integração constante era apresentado como um problema por resolver [33]. Desde essa

data, foram propostos integradores simpléticos e adaptativos em sistemas reversíveis e, também, foram apresentadas propostas que não assumem a reversibilidade do sistema. Esta última abordagem funciona para todos os métodos de passo simples. A ideia subjacente à construção do integrador é a adição de pequenas perturbações à discretização, tal que o comportamento qualitativo de longo prazo seja recuperado, sem afectar a ordem de convergência.

Nesta última classe, incluem-se o método de Euler simplético adaptativo e o método Störmer-Verlet adaptativo, a serem introduzidos no capítulo 6. Ambos os métodos, embora com passo de integração variável, têm natureza simplética, atendendo à forma como foram construídos. Estes métodos numéricos, apesar de produzirem aproximações numéricas numa malha onde os pontos não são equidistantes, podem ser perspectivados como métodos simpléticos de passo de integração fixo, aplicados a um sistema hamiltoniano diferente [10].

Capítulo 5

O problema de Hill

O problema dos n corpos é um problema antigo, remontando a Euler, Lagrange e Poincaré, mas muito pertinente actualmente. Os princípios da mecânica, incluindo a lei de gravitação universal, permitem determinar o movimento de objectos no espaço, tais como estrelas, planetas, asteróides e até mesmo trajectórias de naves espaciais. O modelo usado para estudar a trajectória de uma nave ou um movimento de um asteróide é o problema restrito dos $n+1$ -corpos: n corpos celestiais movem-se sob influência mútua e a nave ou o asteróide movem-se no campo desses corpos, mas não influenciando o seu movimento, em virtude da sua massa infinitesimal (quando comparada com a massa dos n -corpos).

No caso do sistema solar, o movimento dos n corpos pode ser medido e predito com grande precisão, dando origem a efemérides - uma efeméride é uma lista de posições e velocidades de corpos celestes, em função do tempo, em algum sistema de coordenadas. Uma efeméride pode ser considerada como a solução do problema dos n -corpos e forma o campo gravitacional que determina o movimento da nave ou asteróide. Um exemplo de uma efeméride é a solução simplificada do problema dos n -corpos, com n pequeno, como o caso do movimento da Terra e da Lua sob a sua atracção mútua - uma solução para o problema dos dois corpos. Neste caso, o modelo usado para estudar o movimento de uma nave é o problema dos três corpos na sua versão restrita.

Para levar uma nave da Terra para outras partes do sistema solar é necessário encontrar soluções do movimento da nave sob a influência dos n corpos, o qual constitui um problema muito difícil. Por este motivo, será satisfatório simplificar o problema, considerando apenas a força gravitacional entre a nave e apenas um corpo de cada vez, recorrendo à noção de decomposição Kepleriana do sistema solar - aproxima-se a solução do problema dos n corpos a uma cadeia de soluções do problema dos dois corpos, nomeadamente as soluções cónicas descobertas por Kepler.

Para viajar no espaço com o mínimo de recursos é imperativo apelar à dinâmica do sistema;

evidentemente, é possível não fazê-lo, mas será necessário, por exemplo, usar mais combustível e, em alguns casos, o uso da decomposição Kepleriana do espaço é insuficiente (no caso das cónicas não serem uma boa aproximação do movimento da nave). Essa solução será usada como uma primeira sugestão de solução; será adequado usar as soluções do problema dos três corpos para o movimento da nave. Para estudar o movimento da nave em presença de dois corpos é essencial um domínio das soluções do problema restrito dos três corpos. Consequentemente, o estudo do problema dos três corpos na sua versão restrita é um tópico, por si só, pertinente.

Certas missões não seriam uma realidade sem trajectórias apropriadas e económicas. As missões espaciais têm dependido de conceitos de trajectórias e ferramentas desenvolvidas nos anos 50 e 60 do século passado, largamente baseadas na decomposição Kepleriana do sistema solar. Esta aproximação ainda é suficiente para algumas missões, mas novos paradigmas de trajetórias devem ser desenvolvidas para fazer face aos desafios actuais. Neste sentido, uma compreensão detalhada do problema restrito dos três corpos e, em particular, com a dinâmica associada aos pontos de equilíbrio, é absolutamente fundamental para continuar a explorar o espaço. O uso do problema restrito dos três corpos no desenho das missões é vantajoso, já que permite construir trajectórias eficientes, isto é, com um consumo mínimo de combustível. O futuro é na direcção da optimização das missões espaciais, na eficiente afectação dos recursos, tais como o combustível, mas também, por exemplo, do tempo e do uso da nave [27].

Além do já mencionado, o problema restrito fornece uma boa aproximação a situações físicas, nomeadamente, a determinação do movimento da Lua à volta da Terra, dada a presença do Sol. De facto, o problema é quase circular (a excentricidade da órbita da Terra é, aproximadamente, 0.017,) quase planar (as órbitas da Terra e da Lua estão muito próximas do plano da eclíptica) e os valores para os rácios das massas e das distância entre os corpos satisfazem as condições do problema dos três corpos.

Este capítulo inicia-se pela apresentação sumária do problema dos n corpos, seguida de uma síntese do problema dos três corpos: numa primeira fase, o problema geral e, numa segunda fase, o problema restrito. Numa fase posterior, faz-se a transição para o problema de Hill, o qual é uma modificação ao problema restrito dos três corpos. A consideração deste caso particular do problema restrito dos três corpos permite encontrar outras soluções periódicas do problema dos três corpos.

5.1 O problema dos n corpos

O problema dos n -corpos é um sistema de equações diferenciais ordinárias que descrevem o movimento de n pontos que se movem sob a influência das leis de Newton, onde as únicas forças a actuar são as atracções gravitacionais mútuas. Este problema clássico fornece uma descrição

precisa do sistema solar e de outros sistemas da astronomia. A mecânica de Newton possibilita um quase completo entendimento do movimento dos planetas, satélites, estrelas, galáxias e do universo como um todo [3].

A mecânica clássica, a mecânica de Newton, não tem uma validade universal. A descrição de fenómenos a uma escala muito pequena, tais como os da física atómica ou nuclear, é adequadamente feita pela mecânica quântica; fenómenos que envolvam velocidades muito próximas da velocidade da luz devem ser descritos pela relatividade. No entanto, tal não significa que a mecânica de Newton perdeu o seu valor. Na realidade, tanto a mecânica quântica como as teorias especial e geral da relatividade podem ser vistas como uma extensão da mecânica clássica, no sentido que elas reproduzem os resultados da mecânica de Newton no caso limite apropriado. Pode dizer-se que a mecânica quântica e a relatividade confirmam a correcção da mecânica clássica, dentro da sua amplitude de validade. É, de facto, uma teoria que fornece uma descrição coerente e satisfatória de fenómenos físicos, tais como as órbitas planetárias, tratadas neste capítulo [20].

O problema dos n -corpos está resolvido para $n = 2$, reduzindo-se ao problema de Kepler. Para $n \geq 3$ o problema não é resolúvel da mesma forma como o problema dos dois corpos. De facto, há evidência de que o problema geral dos n -corpos não é solúvel, embora milhares de artigos tenham sido escritos - sobre soluções especiais, estimativas assintóticas, existência ou não existência de integrais do movimento, soluções em série, singularidades, existência, estabilidade e bifurcações de soluções periódicas [37]. Como não é conhecida nenhuma solução geral, os investigadores procuraram e encontraram classes especiais de soluções, tais como as soluções periódicas; as soluções periódicas mais simples do problema dos n -corpos são aquelas onde as partículas se movem uniformemente ao longo de órbitas circulares concêntricas num plano fixo. Num sistema de coordenadas rotativo adequado, estas soluções aparecem em equilíbrio e, por isso, são chamadas de soluções de equilíbrio relativo [35].

5.1.1 Equações do movimento

Considere-se o movimento de n pontos materiais $P_i(x_i, y_i, z_i)$, com $i = 1, \dots, n$, no espaço euclidiano tridimensional, sendo $n > 1$, e $m_i > 0$ a massa desse ponto, num sistema de coordenadas cartesianas fixo. Admite-se que um corpo esférico simétrico (os corpos celeste são considerados, grosso modo, como esferas) actua como se a sua massa estivesse concentrada no seu centro.

A distância entre dois pontos P_i e P_j é

$$r_{ij}^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2, \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (5.1)$$

É usual usar a notação q^i para representar x_i, y_i ou z_i , na referência a projecções num dado eixo coordenado, e \mathbf{q} para representar uma dessas $3n$ possíveis coordenadas, ou seja, $\mathbf{q} =$

$(\mathbf{q}^1, \mathbf{q}^2, \dots, \mathbf{q}^n) \in \mathbb{R}^{3n}$.

A função potencial para a lei da atracção de Newton é

$$V = - \sum_{1 \leq i < j \leq n} \frac{Gm_i m_j}{r_{ij}}, \quad (5.2)$$

onde G é a constante de gravitação universal ou constante de Newton, cujo valor é

$$G = 6.67 \times 10^{-11} \text{Nm}^2 \text{kg}^{-2}.$$

As equações do movimento de Newton podem ser escritas da forma abreviada

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} \quad (5.3)$$

onde \mathbf{F} representa a força,

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i &= - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}^i} \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{Gm_i m_j (\mathbf{q}^j - \mathbf{q}^i)}{r_{ij}^3}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

$\mathbf{a} = \ddot{\mathbf{q}}$ representa a aceleração e $m = \text{diag}(m_1 m_1 m_1, \dots, m_n m_n m_n)$ é a matriz das massas. De acordo com a lei gravitacional de Newton, cada par de partículas no universo é mutuamente atraída com uma força proporcional ao produto das suas massas, inversamente proporcional ao quadrado da sua distância e na direcção da linha que as une. Como as massas são sempre positivas, a força é sempre atractiva.

Estas equações do movimento podem ser escritas com a forma de um sistema de $6n$ equações diferenciais de primeira ordem

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{q}^i &= \mathbf{v}_i \\ m_i \frac{d}{dt} \mathbf{v}_i &= \mathbf{F}_i, \end{aligned} \quad (5.5)$$

onde \mathbf{v} representa a velocidade.

Este sistema pode ser reduzido a um outro sistema com apenas $6n - 12$ equações diferenciais de primeira ordem, através da utilização dos 10 integrais clássicos do problema dos n corpos, para qualquer $n > 1$ - os seis integrais do centro de massa, os três integrais do momento cinético e o integral da energia - juntamente com a eliminação do tempo e da eliminação do nodos [4, 37, 42]. As equações de Euler-Lagrange (2.4) são equivalentes às equações de Newton (5.5). Considere-se

a função Lagrangiana dada pela diferença entre a energia cinética e potencial

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = T(\dot{\mathbf{q}}) - V(\mathbf{q}), \quad (5.6)$$

assumindo-se que a energia cinética é apenas função das velocidades e a energia potencial é apenas função das posições. Sendo a energia cinética dada por

$$T = \frac{1}{2}m\|\dot{\mathbf{q}}\|^2, \quad (5.7)$$

obtêm-se as equações de Newton, a partir das equações de Euler-Lagrange (2.4), fazendo

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \right) &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right) - \left(\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}} \right) \\ &= \frac{d}{dt} (m\dot{\mathbf{q}}) - \mathbf{F} \\ &= m\ddot{\mathbf{q}} - \mathbf{F} \\ &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

As equações de Newton constituem um sistema de equações diferenciais ordinárias de segunda ordem. Para o resolver é necessário dispor das condições iniciais $(\mathbf{q}_0, \dot{\mathbf{q}}_0)$; conhecidas as posições e velocidades iniciais, é possível determinar quaisquer posições e velocidades futuras.

Equações hamiltonianas do movimento em sistema inercial

Introduza-se a quantidade de movimento $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}}$, onde $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n) \in \mathbb{R}^{3n}$. A energia cinética é dada por

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{\|\mathbf{p}_i\|^2}{2m_i}, \quad (5.8)$$

e a função potencial V é dada por 5.2.

A função Hamiltoniana pode ser escrita como a soma da energia cinética e potencial

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\mathbf{p}^T m^{-1}\mathbf{p} + V \\ &= T + V, \end{aligned} \quad (5.9)$$

sendo uma constante do movimento, já que $\frac{dH}{dt} = 0$.

As equações do movimento assumem a forma

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{q}}^i &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \\ &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}\end{aligned}\tag{5.10}$$

e

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{p}}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}^i} \\ &= -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}^i} \\ &= \mathbf{F}_i.\end{aligned}\tag{5.11}$$

A solução geral destas equações é desconhecida para $n > 2$. Somente se conhecem classes de soluções particulares, tal como os n corpos a moverem-se em círculos concêntricos com velocidade uniforme.

A Hamiltoniana 5.9 é invariante sob a acção $(q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n) \rightarrow (Aq^1 + b, \dots, Aq^n + b, Ap_1, \dots, Ap_n)$, onde A é uma matriz de rotação e b é um vector constante. Esta simetria implica que as equações do movimento 5.10 e 5.11 admitam o momento linear

$$L = p_1 + \dots + p_n$$

e o momento angular

$$I = (q^1)^T J p_1 + \dots + (q^n)^T J p_n$$

como integrais do movimento [35].

Equações hamiltonianas do movimento em sistema rotativo

Considere-se o problema dos n -corpos plano. Seja a matriz J da forma 2.9

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

e

$$\exp(\omega Jt) = \begin{pmatrix} \cos \omega t & \sin \omega t \\ -\sin \omega t & \cos \omega t \end{pmatrix}.$$

Considerem-se os vectores $\mathbf{q} = (q^1, q^2)^T$ e $\mathbf{p} = (p_1, p_2)^T$. Introduza-se um sistema de coordenadas que roda uniformemente, com frequência ω ,

$$q^i = \exp(\omega Jt) \mathbf{q}^i, \quad p_i = \exp(\omega Jt) \mathbf{p}_i.$$

Como J é anti-simétrica, $\exp(\omega Jt)$ é ortogonal para todo o t , e então a transformação de variáveis é simpléctica.

A função Hamiltoniana para o problema dos n corpos num sistema de coordenadas rotativo é

$$H = \sum_{i=1}^n \frac{\|p_i\|^2}{2m_i} - \sum_{i=1}^n \omega (q^i)^T J p_i - \sum_{1 \leq i, j \leq n} \frac{G m_i m_j}{\|q^i - q^j\|}. \quad (5.12)$$

As equações do movimento são

$$\begin{aligned} \dot{q}^i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ &= \frac{p_i}{m_i} + \omega J q^i, \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q^i} \\ &= \omega J p_i - \sum_{j=1}^n \frac{G m_i m_j (q^i - q^j)}{\|q^i - q^j\|^3}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Sem perder generalidade, é legítimo considerar $\omega = 1$ e $G = 1$, fazendo um reescalamento adequado.

As equações do movimento 5.13 já não são invariantes sob translações. A Hamiltoniana 5.12 é invariante sob rotações, ou seja, a transformação simpléctica $x_i \rightarrow A x_i, y_i \rightarrow A y_i$ deixa a Hamiltoniana fixa para todas as rotações A . O momento angular total

$$I = x_1^T J y_1 + \cdots + x_n^T J y_n$$

é um invariante do movimento [35].

5.2 O problema geral dos três corpos

O problema geral dos três corpos é definido da forma que se segue. Três partículas com massa arbitrária atraem-se mutuamente de acordo com a lei de Newton da gravitação, sendo livres de se mover no espaço. Dado qualquer conjunto de condições iniciais, determine-se o seu movimento. Ao passo que o problema dos dois corpos é resolvido pela utilização de funções elementares, o problema dos três corpos é não linear e não existe nenhuma solução similar à do problema

dos dois corpos. O problema dos três corpos tem sido, ao longo dos tempos, muito atractivo na área da Mecânica Celeste e da Matemática, já que está intimamente associado à questão da estabilidade do sistema solar.

No início do século XX, Sundman determinou uma solução em série de potência convergente, válida para todo o t . No entanto, esta solução não fornece nenhuma informação qualitativa sobre o comportamento do sistema e, por outro lado, a taxa de convergência da série é considerada demasiado lenta para qualquer uso prático. O teorema de Sundman representa o resultado de maior alcance conhecido até agora sobre soluções gerais do problema dos três corpos, mas infelizmente este método não é extensivo ao caso $n > 3$ [4, 42].

5.2.1 Equações do movimento

Considerem-se as massas dos três corpos m_1, m_2 e m_3 , com vectores posição

$$\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)^T, \quad \mathbf{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)^T, \quad \mathbf{r}_3 = (x_3, y_3, z_3)^T,$$

respectivamente, e as distâncias

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{12} &= [(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2]^{\frac{1}{2}} \\ \mathbf{r}_{13} &= [(x_1 - x_3)^2 + (y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2]^{\frac{1}{2}} \\ \mathbf{r}_{23} &= [(x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2 + (z_2 - z_3)^2]^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (5.14)$$

num sistema de coordenadas inercial.

A função potencial é

$$V = -G \left(\frac{m_1 m_2}{\mathbf{r}_{12}} + \frac{m_1 m_3}{\mathbf{r}_{13}} + \frac{m_2 m_3}{\mathbf{r}_{23}} \right), \quad (5.15)$$

onde G representa a constante de gravitação gaussiana.

As equações do movimento correspondentes são

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (5.16)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{r}}_1 &= -Gm_2 \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} + Gm_3 \frac{\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1|^3}, \\ \ddot{\mathbf{r}}_2 &= -Gm_3 \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|^3} + Gm_1 \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3}, \\ \ddot{\mathbf{r}}_3 &= -Gm_1 \frac{\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1|^3} + Gm_2 \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|^3}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

sistema de equações de ordem dezoito. As parcelas que figuram no segundo membro das equações 5.17 têm significado físico; por exemplo, a primeira parcela no segundo membro da primeira equação representa a força por unidade de massa que actua no primeiro corpo devido à presença do segundo corpo, tendo as outras parcelas significado análogo.

Então, uma redução da massa do terceiro corpo significa uma redução da sua influência no movimento de m_1 e m_2 , ou seja, à medida que $m_3 \rightarrow 0$, as duas primeiras equações de 5.17 aproximam-se de (considerando $G = 1$):

$$\begin{aligned}\ddot{\mathbf{r}}_1 &= -m_2 \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3}, \\ \ddot{\mathbf{r}}_2 &= -m_1 \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3},\end{aligned}\tag{5.18}$$

enquanto que a terceira equação se mantém inalterada. Este procedimento permite desacoplar as equações, já que o movimento de m_1 e m_2 pode ser, agora, determinado sem considerar o efeito do terceiro corpo.

Saliente-se que não se considera o caso limite $m_3 = 0$, mas $m_3 \neq 0$ e suficientemente pequeno de forma a não afectar o movimento de m_1 e m_2 . Desta forma, as equações 5.18 são aproximadas, ao passo que a terceira equação de 5.17 é exacta.

A Hamiltoniana e, conseqüentemente, a Lagrangiana do problema geral dos três corpos é invariante sob movimentos euclidianos, isto é, sob translações e rotações, originando o momento linear e o momento angular, respectivamente, como integrais do movimento [36].

Regra geral, na área das ciências físicas, espera-se que um modelo físico mais complexo demonstre uma aproximação melhor à realidade do que um modelo físico mais simples e, neste sentido, seja uma opção privilegiada em relação a um modelo mais simples. No entanto, o problema geral dos três corpos é uma das excepções à regra; por um lado, tem somente algumas poucas aplicações na mecânica celeste e, por outro lado, o que se conhece sobre o problema geral é consideravelmente menos do que se conhece sobre o problema restrito.

Neste contexto, o usual é trabalhar no problema restrito e, no caso das restrições impostas ao problema geral serem muito severas, são feitas modificações e generalizações, de forma a que o cenário do problema restrito seja suficientemente abrangente e não haja necessidade de se fazer a transição para o problema geral.

5.3 O problema restrito dos três corpos

Dois corpos giram à volta do seu centro de massa com velocidade uniforme, em órbitas circulares, sob a influência da sua atracção gravitacional mútua; um terceiro corpo, atraído pelos outros dois corpos mas sem influenciar o seu movimento, move-se no plano definido por eles. O problema

restrito dos três corpos é descrever o movimento deste terceiro corpo.

É usual designar os dois corpos por primários, com massas m_1 e m_2 arbitrárias, mas com uma distribuição interna da massa que os permita considerar pontos de massa. A massa do terceiro corpo, representada por m_3 , é muito mais pequena do que m_1 e m_2 .

O problema restrito dos três corpos é um sistema hamiltoniano de equações diferenciais, o qual descreve o movimento de uma partícula infinitesimal (o satélite) que se move sob a influência gravitacional de duas partículas com massa finita (os primários), partículas estas que se movem numa órbita circular do problema de Kepler. Diz-se que o problema restrito é um caso limite do problema geral dos três corpos, quando uma das massas tende para zero e, então, para cada resultado do problema restrito deverá existir o resultado correspondente no problema geral [36]. Note-se que:

1. o problema geral admite quaisquer condições iniciais, ao passo que o problema restrito impõe órbitas circulares aos primários;
2. no problema geral, as massas dos três corpos são arbitrárias, ao passo que no problema restrito somente as massas dos primários o são, impondo-se que a massa do terceiro corpo seja substancialmente mais pequena do que a massa dos outros dois.

5.3.1 Equações do movimento

O movimento dos corpos pode ser descrito num sistema de coordenadas inercial ou num sistema de coordenadas sinódico.

Sistema de coordenadas inercial

O equilíbrio entre as forças gravitacionais e as forças centrífugas exige que

$$G \frac{m_1 m_2}{l^2} = m_2 a \omega^2 = m_1 b \omega^2, \quad (5.19)$$

onde G representa a constante de gravitação gaussiana, ω representa a velocidade angular de m_1 e m_2 , l representa a distância entre os dois corpos e

$$a = \frac{m_1 l}{M} \quad \text{e} \quad b = \frac{m_2 l}{M}, \quad (5.20)$$

com $M = m_1 + m_2$. Da equação 5.19 obtêm-se as equações

$$G m_1 = a \omega^2 l^2, \quad G m_2 = b \omega^2 l^2,$$

as quais adicionadas membro a membro originam

$$G(m_1 + m_2) = \omega^2 l^3, \quad (5.21)$$

conhecida como a terceira lei de Kepler.

Sejam (X_1, Y_1) , (X_2, Y_2) e (X, Y) as coordenadas de m_1 , m_2 e m_3 , respectivamente. Tem-se que [45]:

$$\begin{aligned} X_1 &= b \cos \omega t^*, & X_2 &= -a \cos \omega t^* \\ Y_1 &= b \sin \omega t^*, & Y_2 &= -a \sin \omega t^*, \end{aligned}$$

onde o símbolo t^* representa o tempo.

As coordenadas de m_1 e m_2 são dependentes do tempo e, por esta via, introduz-se uma dependência temporal explícita nas equações do movimento. A função potencial é

$$V = -G \left(\frac{m_1}{R_1} + \frac{m_2}{R_2} \right), \quad (5.22)$$

onde as distâncias R_i , $i = 1, 2$ são dadas por

$$R_i = \left[(X - X_i)^2 + (Y - Y_i)^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.23)$$

As equações do movimento são

$$\begin{aligned} \frac{d^2 X}{dt^{*2}} &= - \frac{\partial V(X, Y, t^*)}{\partial X} \\ &= -G \left[\frac{m_1 (X - b \cos \omega t^*)}{R_1^3} + \frac{m_2 (X + a \cos \omega t^*)}{R_2^3} \right] \end{aligned} \quad (5.24)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d^2 Y}{dt^{*2}} &= - \frac{\partial V(X, Y, t^*)}{\partial Y} \\ &= -G \left[\frac{m_1 (Y - b \sin \omega t^*)}{R_1^3} + \frac{m_2 (Y + a \sin \omega t^*)}{R_2^3} \right]. \end{aligned} \quad (5.25)$$

As equações do movimento no sistema de coordenadas inercial contém parâmetros físicos, os quais não são todos independentes. É possível reescrever as equações 5.24 e 5.25 dependentes

de um único parâmetro. Considerem-se as seguintes quantidades adimensionais:

$$\begin{aligned}
 \xi &= \frac{X}{l} \\
 \eta &= \frac{Y}{l} \\
 t &= \omega t^* \\
 \mu_1 &= \frac{m_1}{M} = \frac{a}{l} \\
 \mu_2 &= \frac{m_2}{M} = \frac{b}{l} \\
 \rho_1 &= \frac{R_1}{l} \\
 \rho_2 &= \frac{R_2}{l}.
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

As equações do movimento adimensionais, que correspondem às equações 5.24 e 5.25 são [45]:

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2\xi}{dt^2} &= -\frac{\partial\phi}{\partial\xi} \\
 &= -\left[\mu_1 \frac{(\xi - \mu_2 \cos t)}{\rho_1^3} + \mu_2 \frac{(\xi - \mu_1 \cos t)}{\rho_2^3} \right],
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

e

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2\eta}{dt^2} &= -\frac{\partial\phi}{\partial\eta} \\
 &= -\left[\mu_1 \frac{(\eta - \mu_2 \sin t)}{\rho_1^3} + \mu_2 \frac{(\eta - \mu_1 \sin t)}{\rho_2^3} \right],
 \end{aligned} \tag{5.28}$$

respectivamente, onde a função potencial é dada por

$$\begin{aligned}
 \phi &= \frac{V}{l^2\omega^2} \\
 &= -\frac{\mu_1}{\rho_1} - \frac{\mu_2}{\rho_2},
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

e

$$\begin{aligned}
 \rho_1^2 &= (\xi - \mu_2 \cos t)^2 + (\eta - \mu_2 \sin t)^2 \\
 \rho_2^2 &= (\xi + \mu_1 \cos t)^2 + (\eta + \mu_1 \sin t)^2.
 \end{aligned} \tag{5.30}$$

Energia do sistema em coordenadas inerciais

A energia total no problema restrito não é constante. Seja h_3 a energia total de m_3 por unidade de massa [45]:

$$h_3 = \frac{1}{2} \left(\frac{dX}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{dY}{dt} \right)^2 + V. \quad (5.31)$$

A energia total das partículas individuais é a soma das suas energias, ou seja,

$$H = m_3 h_3 + H_{12},$$

onde H_{12} representa a energia do sistema m_1, m_2 , com expressão

$$H_{12} = \frac{1}{2} \omega^2 (m_1 b^2 + m_2 a^2) - G \frac{m_1 m_2}{l}.$$

A primeira parcela corresponde à energia cinética e a segunda à energia potencial. Usando 5.19 obtém-se

$$\frac{1}{2} \omega^2 (m_1 b^2 + m_2 a^2) = \frac{1}{2} G \frac{m_1 m_2}{l}, \quad (5.32)$$

ou seja,

$$H_{12} = -\frac{1}{2} \frac{G m_1 m_2}{l}$$

é constante. A energia total do sistema formado pelos 3 corpos é dada por

$$H = m_3 h_3 - \frac{1}{2} \frac{G m_1 m_2}{l} \quad (5.33)$$

não é uma constante do movimento.

A não conservação da energia no problema restrito dos 3 corpos seria de esperar, na medida em que se negligencia o efeito de m_3 no movimento de m_1 e m_2 . No caso do problema geral dos 3 corpos, a função potencial não depende explicitamente do tempo e, conseqüentemente, a energia total do sistema é conservada.

Sistema de coordenadas sinódico

A função potencial contém o tempo de forma explícita e, conseqüentemente, a Hamiltoniana depende explicitamente do tempo, não sendo uma constante do movimento. Neste contexto, seria interessante determinar um sistema de coordenadas no qual a função potencial não dependesse do tempo de forma explícita.

As equações do movimento em tal sistema rotativo ou sinódico são [45]:

$$\frac{d^2 \bar{x}}{dt^{*2}} - 2\omega \frac{d\bar{y}}{dt^*} - \omega^2 \bar{x} = -G \left[m_1 \frac{\bar{x} - b}{\bar{r}_1^3} + m_2 \frac{\bar{x} + a}{\bar{r}_2^3} \right] \quad (5.34)$$

e

$$\frac{d^2\bar{y}}{dt^{*2}} + 2\omega\frac{d\bar{x}}{dt^*} - \omega^2\bar{y} = -G\left[\frac{m_1\bar{y}}{\bar{r}_1^3} + \frac{m_2\bar{y}}{\bar{r}_2^3}\right], \quad (5.35)$$

onde a transformação de coordenadas do sistema inercial para o sistema sinódico é dada por

$$\begin{aligned} X &= \bar{x} \cos \omega t^* - \bar{y} \sin \omega t^* \\ Y &= \bar{x} \sin \omega t^* + \bar{y} \cos \omega t^*, \end{aligned} \quad (5.36)$$

e

$$\begin{aligned} \bar{r}_1 &= [(\bar{x} - b)^2 + \bar{y}^2]^{\frac{1}{2}} \\ \bar{r}_2 &= [(\bar{x} + a)^2 + \bar{y}^2]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (5.37)$$

A função potencial é

$$V^* = -\frac{\omega^2}{2}(\bar{x}^2 + \bar{y}^2) - G\left(\frac{m_1}{r_1} + \frac{m_2}{r_2}\right), \quad (5.38)$$

sendo as equações do movimento 5.34 e 5.35 determinadas a partir das igualdades

$$\frac{d^2\bar{x}}{dt^{*2}} - 2\omega\frac{d\bar{y}}{dt^*} = -\frac{\partial V^*}{\partial \bar{x}}$$

e

$$\frac{d^2\bar{y}}{dt^{*2}} + 2\omega\frac{d\bar{x}}{dt^*} = -\frac{\partial V^*}{\partial \bar{y}}.$$

As equações 5.34 e 5.35 podem ser reescritas num formato adimensional, introduzindo-se as variáveis:

$$\begin{aligned} x &= \frac{\bar{x}}{l} \\ y &= \frac{\bar{y}}{l} \\ t &= \omega t^* \\ r_1 &= \frac{\bar{r}_1}{l} \\ r_2 &= \frac{\bar{r}_2}{l} \\ \mu_{1,2} &= \frac{m_{1,2}}{M}. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Então, as equações 5.34 e 5.35 escrevem-se como:

$$\ddot{x} - 2\dot{y} = \bar{\Omega}_x \quad (5.40)$$

e

$$\ddot{y} + 2\dot{x} = \bar{\Omega}_y, \quad (5.41)$$

respectivamente, onde os índices representam derivadas parciais. A função $\bar{\Omega}$ é definida a partir da função V^* , em 5.38, da seguinte forma

$$\begin{aligned}\bar{\Omega} &= -\frac{V^*}{l^2\omega^2} \\ &= \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \frac{\mu_1}{r_1} + \frac{\mu_2}{r_2},\end{aligned}\tag{5.42}$$

onde

$$\begin{aligned}r_1^2 &= (x - \mu_2)^2 + y^2 \\ r_2^2 &= (x + \mu_1)^2 + y^2.\end{aligned}\tag{5.43}$$

A modificação de $\bar{\Omega}$ por adição de uma constante

$$\begin{aligned}\Omega &= \bar{\Omega} + \frac{1}{2}\mu_1\mu_2 \\ &= \frac{1}{2}(\mu_1 r_1^2 + \mu_2 r_2^2) + \frac{\mu_1}{r_1} + \frac{\mu_2}{r_2} \\ &= \mu_1 \left(\frac{r_1^2}{2} + \frac{1}{r_1} \right) + \mu_2 \left(\frac{r_2^2}{2} + \frac{1}{r_2} \right),\end{aligned}\tag{5.44}$$

não afecta as equações do movimento, mas permite que elas tenham uma forma mais simétrica. As equações 5.40 e 5.41 assumem a forma

$$\ddot{x} - 2\dot{y} = \Omega_x\tag{5.45}$$

e

$$\ddot{y} + 2\dot{x} = \Omega_y,\tag{5.46}$$

respectivamente.

O integral do movimento destas equações é

$$\dot{x}^2 + \dot{y}^2 = 2\Omega - C.\tag{5.47}$$

Ele é obtido somando-se o produto da equação 5.45 por $2\frac{dx}{dt}$ com o produto da equação 5.46 com $2\frac{dy}{dt}$, resultando

$$2\frac{dx}{dt}\frac{d^2x}{dt^2} + 2\frac{dy}{dt}\frac{d^2y}{dt^2} = 2\left(\frac{dx}{dt}\Omega_x + \frac{dy}{dt}\Omega_y\right),\tag{5.48}$$

a qual é uma diferencial exacta, já que Ω depende, unicamente, de x e y .

Integrando 5.48, obtém-se

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2 = 2\Omega - C,$$

onde C representa a constante de integração de Jacobi e o primeiro membro representa o quadrado da velocidade do terceiro corpo, no sistema de coordenadas sinódico. Este integral, chamado de integral de Jacobi, pode ser reescrito como

$$v^2 = 2\Omega - C.$$

Qualquer conjunto de números x, y, \dot{x}, \dot{y} que satisfaça a equação 5.47 representa, para um dado C , o movimento possível, ou seja, permite estabelecer regiões no plano (x, y) onde o movimento, dadas as condições iniciais, é possível. Estas regiões do movimento são determinadas pelo cruzamento da informação fornecida por 5.47, com as curvas de Hill, as quais permitem saber as suas fronteiras.

Algumas considerações sobre os parâmetros

Os parâmetros μ_1, μ_2 não são independentes, mas obedecem à relação

$$\mu_1 + \mu_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} = 1. \quad (5.49)$$

No caso dos sistemas de variáveis adimensionais, μ_1 e μ_2 representam a massa dos corpos primários, cuja distância é unitária. Desta forma, as equações do movimento 5.45 e 5.46 contêm, efectivamente, um único parâmetro; para eliminar um dos parâmetros usa-se a relação 5.49.

Neste contexto, pode escrever-se de forma explícita as expressões de Ω_x e Ω_y que figuram nas equações 5.45 e 5.46, fazendo $\mu_2 = \mu$ e $\mu_1 = 1 - \mu$ e usando as expressões 5.43 e 5.44. Para Ω obtém-se

$$\Omega = \frac{1}{2}[(1 - \mu)r_1^2 + \mu r_2^2] + \frac{1 - \mu}{r_1} + \frac{\mu}{r_2}, \quad (5.50)$$

e para as suas derivadas parciais obtêm-se

$$\Omega_x = x - \frac{(1 - \mu)(x - \mu)}{r_1^3} - \frac{\mu(x + 1 - \mu)}{r_2^3} \quad (5.51)$$

e

$$\Omega_y = y \left(1 - \frac{1 - \mu}{r_1^3} - \frac{\mu}{r_2^3} \right). \quad (5.52)$$

Desta forma, as equações do movimento 5.45 e 5.46 podem ser escritas de forma explícita como

$$\ddot{x} - 2\dot{y} = x - \frac{(1 - \mu)(x - \mu)}{r_1^3} - \frac{\mu(x + 1 - \mu)}{r_2^3} \quad (5.53)$$

e

$$\ddot{y} + 2\dot{x} = y \left(1 - \frac{1 - \mu}{r_1^3} - \frac{\mu}{r_2^3} \right), \quad (5.54)$$

equações estas que são as equações de Euler-Lagrange [27].

O tempo adimensional t é, também, uma medida do ângulo de rotação do sistema sinódico durante o tempo t^* . Um outro significado físico atribuído a t é o facto de ele representar a longitude de m_1 ou de μ_1 .

Admita-se que as variáveis x e y do sistema sinódico adimensional são constantes. Então, em termos físicos, tal significa que o terceiro corpo é fixo relativamente ao sistema de coordenadas sinódico, ou seja, está a mover-se, no sistema de coordenadas inercial, num círculo com velocidade constante. Sem perda de generalidade, pode considerar-se $\omega = 1$.

5.3.2 As equações do movimento hamiltonianas

O formalismo hamiltoniano é a estrutura matemática natural, na qual se desenvolve a teoria dos sistemas mecânicos conservativos, em particular, as equações da mecânica celeste. As equações do movimento no sistema inercial 5.27 e 5.28 e as no sistema sinódico 5.45 e 5.46 podem ser escritas no formalismo hamiltoniano 2.7.

O uso do sistema de coordenadas sinódico tem a vantagem de eliminar a dependência temporal explícita da função Hamiltoniana, função esta que será, então, um integral do movimento.

Sistema inercial

Considerem-se as variáveis adimensionais $\xi = \frac{X}{l}$ e $\eta = \frac{Y}{l}$ das equações 5.26. Seja $\xi = q^1$ e $\eta = q^2$. A função Lagrangiana é dada por

$$L = \frac{1}{2}((\dot{q}^1)^2 + (\dot{q}^2)^2) - \phi(q^1, q^2, t), \quad (5.55)$$

onde a função potencial é dada por 5.29. Os momentos generalizados do sistema, dados pela equação 2.5, para esta função lagrangiana são

$$p_1 = \dot{q}^1$$

e

$$p_2 = \dot{q}^2.$$

A função Hamiltoniana é, de acordo com 2.6,

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \phi(q^1, q^2, t). \quad (5.56)$$

A função Hamiltoniana depende explicitamente do tempo, já que a função potencial $\phi(q^1, q^2, t)$ exibe uma dependência temporal explícita, via ρ_1 e ρ_2 ; tal significa que a função Hamiltoniana não é constante.

As equações do movimento hamiltonianas no sistema de coordenadas inercial que correspondem a 2.7 são

$$\begin{aligned}\dot{q}^1 &= p_1 \\ \dot{q}^2 &= p_2,\end{aligned}\tag{5.57}$$

e

$$\begin{aligned}\dot{p}_1 &= -\frac{\partial\phi}{\partial q^1} \\ \dot{p}_2 &= -\frac{\partial\phi}{\partial q^2},\end{aligned}\tag{5.58}$$

equações semelhantes à combinação das equações 5.27 e 5.28.

Sistema rotativo

Para eliminar a dependência temporal explícita em ρ_1 e ρ_2 , procede-se como se segue. Como m_1 e m_2 estão numa linha que roda, se essa linha for um dos eixos coordenados Q^1 , essa dependência explícita do tempo desaparece. Seja Q^2 o segundo eixo coordenado que forma um sistema cartesiano com Q^1 . As equações seguintes permitem transformar o sistema de coordenadas inercial q^1, q^2 no sistema rotativo Q^1, Q^2 :

$$\begin{aligned}q^1 &= Q^1 \cos t - Q^2 \sin t \\ q^2 &= Q^1 \sin t + Q^2 \cos t.\end{aligned}$$

Neste caso, obtém-se

$$\begin{aligned}\rho_1^2 &= (Q^2)^2 + (Q^1 - \mu_2)^2 \\ \rho_2^2 &= (Q^2)^2 + (Q^1 + \mu_1)^2,\end{aligned}\tag{5.59}$$

onde $\mu_1 = 1 - \mu$ e $\mu_2 = \mu$.

Como ρ_1 e ρ_2 não dependem explicitamente do tempo, então $\phi(q^1, q^2, t) = V(Q^1, Q^2)$, ou seja, a função hamiltoniana H é independente do tempo. Tem-se

$$\begin{aligned}V(Q^1, Q^2) &= -\frac{\mu_1}{\rho_1} - \frac{\mu_2}{\rho_2} \\ &= -\frac{\mu_1}{[(Q^1 - \mu_2)^2 + (Q^2)^2]^{\frac{1}{2}}} - \frac{\mu_2}{[(Q^1 + \mu_1)^2 + (Q^2)^2]^{\frac{1}{2}}}.\end{aligned}\tag{5.60}$$

A função hamiltoniana é

$$H = \frac{1}{2}(P_1^2 + P_2^2) + Q^2 P_1 - Q^1 P_2 + V(Q^1, Q^2), \quad (5.61)$$

ou em notação matricial

$$H = \frac{1}{2}\|P\|^2 - Q^T J P + V, \quad (5.62)$$

onde a matriz J é da forma 2.9, sendo

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

e $Q, P \in \mathbb{R}^2$. O termo $Q^T J P$ deve-se ao facto do sistema de coordenadas ser rotativo, originando as chamadas forças de Coriolis nas equações do movimento [20].

As equações do movimento são

$$\begin{aligned} \dot{Q}^1 &= P_1 + Q^2 \\ \dot{Q}^2 &= P_2 - Q^1, \end{aligned} \quad (5.63)$$

e

$$\begin{aligned} \dot{P}_1 &= P_2 - \frac{\partial V}{\partial Q^1} \\ \dot{P}_2 &= -P_1 - \frac{\partial V}{\partial Q^2}. \end{aligned} \quad (5.64)$$

Em notação matricial vem

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= JQ + P \\ \dot{P} &= JP - \nabla V_Q. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Quando a Hamiltoniana é uma constante H_0 , existe uma relação entre essa função e a constante C de Jacobi que figura no integral do movimento 5.47, dada por [45]:

$$H_0 = \frac{\mu_1 \mu_2 - C}{2}. \quad (5.66)$$

Tal significa que o integral do movimento 5.47 e a equação $H_0 = \text{const}$ são idênticas. Neste contexto, diz-se que, quando a função Hamiltoniana é independente do tempo, ela desempenha um papel duplo: por um lado, é essencial na dedução das equações do movimento e, por outro lado, representa um integral do movimento.

Em síntese, as constantes H_0 e C relacionam-se pela equação 5.66 e as funções H e Ω relacionam-

se pela expressão

$$H + \Omega = \frac{1}{2}\mu_1\mu_2 + \frac{1}{2}((\dot{Q}^1)^2 + (\dot{Q}^2)^2). \quad (5.67)$$

5.3.3 Equações do movimento em função de variáveis complexas conjugadas

As equações do movimento 5.53 e 5.54 podem ser escritas em função de variáveis complexas conjugadas.

Considerem-se as variáveis

$$p = (x + \mu - 1) + iy$$

e

$$q = \bar{p} = (x + \mu - 1) - iy,$$

onde p representa o vector de P_1 para P_3 no plano complexo. Seja

$$F = \frac{\mu}{\sqrt{pq}} + \frac{1 - \mu}{\sqrt{(1+p)(1+q)}}, \quad F_x = F_p + F_q, \quad F_y = i(F_p - F_q).$$

Resulta

$$\ddot{p} = -2i\dot{p} + p - \mu + 1 - 2F_q$$

e

$$\ddot{q} = 2i\dot{q} + q - \mu + 1 + 2F_p.$$

Introduzindo

$$\begin{aligned} G &= pq + (1 - \mu)(p + q) + 2F \\ &= pq + (1 - \mu)(p + q) + \frac{2\mu}{\sqrt{pq}} + \frac{2 - 2\mu}{\sqrt{(1+p)(1+q)}}, \end{aligned} \quad (5.68)$$

as equações do movimento 5.53 e 5.54 podem ser escritas como

$$\ddot{p} = -2i\dot{p} + G_q \quad (5.69)$$

e

$$\ddot{q} = 2i\dot{q} + G_p. \quad (5.70)$$

5.3.4 Curvas de Hill e pontos de equilíbrio

O integral do movimento 5.47 tem a forma

$$C = F(x, y, \dot{x}, \dot{y}), \quad (5.71)$$

representando um subespaço tridimensional ou uma hipersuperfície, para um valor fixo C . As curvas de velocidade zero ou curvas de Hill resultam da transformação da equação 5.71 em

$$C = F(x, y, 0, 0), \quad (5.72)$$

a qual representa uma curva no plano (x, y) , para um valor fixo C . Substituindo $\dot{x} = \dot{y} = 0$ no integral do movimento 5.47, resulta

$$2\Omega - C = 0, \quad (5.73)$$

expressão das curvas de Hill, para um dado C .

Os pontos $P(x, y, \dot{x}, \dot{y})$ do espaço de fase quadridimensional representam estados do movimento. As singularidades da variedade dos estados do movimento estão localizadas nos pontos de curvas de velocidade zero onde $\Omega_x = \Omega_y = 0$. Então, as singularidades estão definidas pelas equações

$$\begin{aligned} \Omega &= \frac{C}{2} \\ \Omega_x &= 0 \\ \Omega_y &= 0. \end{aligned} \quad (5.74)$$

As equações do movimento 5.45 e 5.46 nos pontos singulares da variedade dos estados de movimento são $\ddot{x} = \ddot{y} = 0$. Por este motivo, os pontos descritos pelas equações 5.74 são chamados de pontos de equilíbrio. Por exemplo, se a terceira partícula está situada num ponto de equilíbrio e com velocidade nula, lá permanecerá. As singularidades podem também ser designadas por pontos estacionários ou por pontos lagrangianos.

Estes pontos lagrangianos são soluções particulares do problema dos três corpos. Num sistema de coordenadas inercial, os três corpos movem-se em círculos concêntricos com velocidade uniforme. Num sistema rotativo com velocidade constante ω , estas soluções aparecem em repouso. Os pontos de equilíbrio ocorrem quando o terceiro corpo se move em órbitas circulares com a mesma frequência que os primários e, então, num sistema rotativo adequado, constituem pontos estacionários. Pode sempre assumir-se que $\omega = 1$, já que tal pode ser compensado por um reescalamiento temporal.

De um ponto de vista físico, os pontos lagrangianos são pontos onde as forças que actuam no terceiro corpo, no sistema de coordenadas sinódico, estão equilibradas; então, não há movimento em relação ao sistema de coordenadas rotativo, e somente forças gravitacionais e centrífugas devem ser consideradas.

A solução das equações 5.74, usando as expressões 5.51 e 5.52, é constituída por cinco pontos L_1, \dots, L_5 [4, 35, 37, 45]:

1. L_1, L_2 e L_3 estão no eixo das abcissas, chamados de pontos colineares, descobertos por

Euler por volta de 1750;

2. $L_4(\mu - \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$ e $L_5(\mu - \frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$, chamados de pontos triangulares, onde se verifica $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = 1$, descobertos por Lagrange por volta de 1760.

Os pontos triangulares são as soluções das equações 5.74, admitindo que $y \neq 0$. No caso de $y = 0$, as abscissas dos pontos colineares são determinadas a partir da equação $\Omega_x = 0$. Esta equação pode ser escrita na forma de uma equação de ordem 5

$$x^5 + (3 - \mu)x^4 + (3 - 2\mu)x^3 - \mu x^2 - 2\mu x - \mu = 0, \quad (5.75)$$

e resolvida para os três valores de x dos pontos colineares (a equação 5.75 não tem mais de três raízes reais para $0 \leq \mu \leq 1$). Na figura 5.1, as abscissas são determinadas pelo método de Newton.

O primário de maior massa, $m_1 = 1 - \mu$, está localizado no ponto $(\mu, 0)$ e o primário de menor massa, $m_2 = \mu$, está localizado no ponto $(\mu - 1, 0)$.

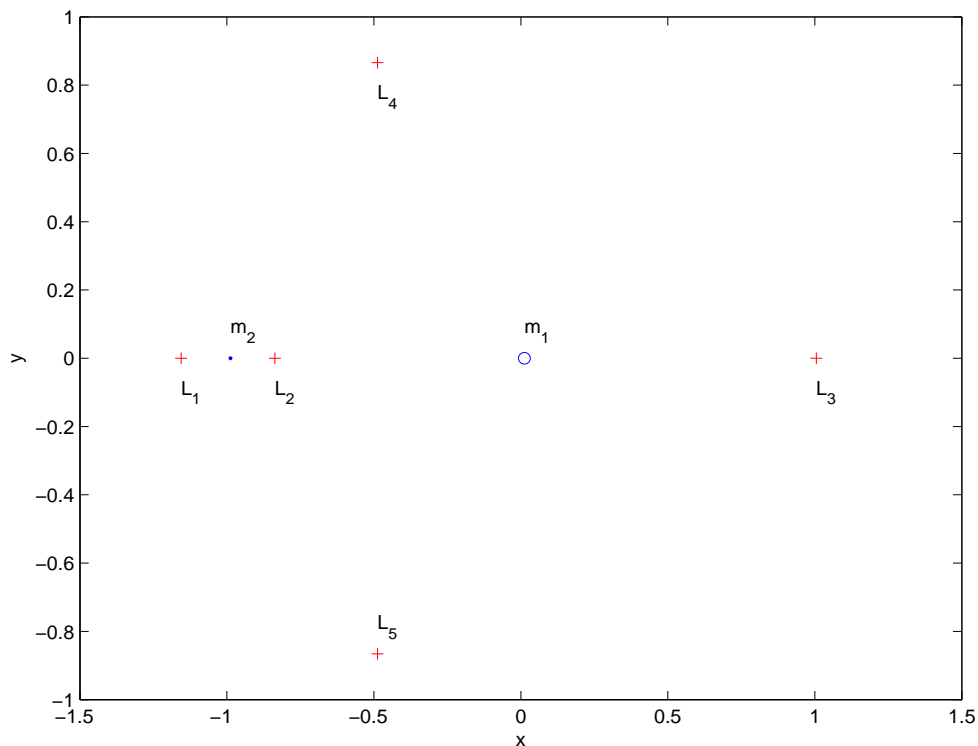


Figura 5.1: Pontos colineares L_1 , L_2 e L_3 e pontos triangulares L_4 e L_5 , para $\mu = \frac{1}{82.27}$

5.3.5 A função $\Omega(x, y)$

A função Ω desempenha um papel central no estudo das regiões de possível movimento, via curvas de Hill, e por isso, enunciam-se alguns resultados relativos a esta função, considerando $0 \leq \mu \leq \frac{1}{2}$ [45]:

1. Tem-se que $\Omega(x, y) \geq \frac{3}{2}$ e, por isso, as curvas de Hill $2\Omega = C$ só existem para $C > 3$;
2. Verificam-se as igualdades

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \Omega(x, y) = \lim_{r_1 \rightarrow 0} \Omega(x, y) = \lim_{r_2 \rightarrow 0} \Omega(x, y) = \infty;$$

3. $\Omega(x, y) = \Omega(x, -y)$;
4. O mínimo absoluto da função $\Omega(x, y)$ ocorre em L_4 e L_5 e os pontos colineares são pontos sela;
5. O declive das curvas de velocidade zero é dado por $-\frac{\Omega_x}{\Omega_y}$, excepto nos pontos colineares no qual é dado por $\pm \sqrt{-\frac{\Omega_{xx}}{\Omega_{yy}}}$;
6. O mínimo da função $\Omega(x, 0)$ ocorre nos pontos colineares;
7. Verificam-se as relações

$$\Omega(L_5) = \Omega(L_4) \leq \Omega(L_3) \leq \Omega(L_1) \leq \Omega(L_2).$$

5.3.6 Regiões do movimento

Sem perda de generalidade, admita-se que $0 \leq \mu \leq \frac{1}{2}$. O comportamento da função 5.50

$$\Omega = \frac{1}{2}[(1 - \mu)r_1^2 + \mu r_2^2] + \frac{1 - \mu}{r_1} + \frac{\mu}{r_2}$$

é a chave para determinar as regiões do movimento, já que está directamente relacionada com as curvas de Hill 5.73

$$2\Omega - C = 0.$$

O interesse das curvas de Hill decorre do integral de Jacobi $v^2 = 2\Omega - C$, o qual fornece o quadrado da velocidade, relativa ao sistema sinódico. Como esta quantidade é, necessariamente, positiva, as curvas de zero velocidade fornecem a equação de uma superfície que separa o espaço em duas partes: aquele onde a velocidade é real e aquele onde a velocidade é imaginária.

Neste contexto, considere-se $2\Omega(L_i) = C_i$, $i = 1, \dots, 5$, sendo L_1, L_2, L_3 os pontos colineares e

L_4, L_5 os pontos triangulares. As regiões do movimento variam com a magnitude dos valores de C , considerando-se os seguintes casos:

- (i) $C > C_2$;
- (ii) $C_1 < C < C_2$;
- (iii) $C_3 < C < C_1$;
- (iv) $C_5 = C_4 < C < C_3$.

Curvas de Hill ovais: $C > C_2$

A situação de $C > C_2$ é possível de obter em três casos distintos: ou $r_1, r_2 \rightarrow \infty$, ou $r_1 \rightarrow 0$, ou $r_2 \rightarrow 0$, já que em qualquer destes casos, tem-se $\Omega \rightarrow \infty$.

Considere-se $r_1, r_2 \rightarrow \infty$. Neste caso, de 5.50, resulta

$$C \approx r^2,$$

situação que, em termos físicos, expressa o facto de, em virtude da grande distância, se poderem negligenciar os efeitos da gravidade em comparação com as forças centrífugas. As curvas de Hill reduzem-se a

$$C^{\frac{1}{2}} = r_z,$$

ou seja, são aproximadamente círculos, representando r_z o raio do círculo de velocidade zero. À medida que C aumenta, as curvas de Hill expandem-se e, por este motivo, o movimento só é possível fora das curvas de Hill.

Considere-se $r_1 \rightarrow 0$ e, então, $r_2 \rightarrow 1$. Na expressão da curva de Hill $C = 2\Omega$, o termo $\frac{2(1-\mu)}{r_1}$ domina, de tal forma que

$$C \approx \frac{2(1-\mu)}{r_1},$$

tendo as curvas de Hill um formato oval em torno de m_1 . À medida que C decresce, melhor a aproximação

$$r_z = r_1 = \frac{2(1-\mu)}{C},$$

já que menores são os efeitos dos termos desprezados, e a forma das curvas de Hill aproxima-se de um círculo. À medida que C aumenta, r_1 diminui e, conseqüentemente, quanto maior o valor de C , menores as curvas ovais se tornam. Como $\frac{d\Omega}{dr_1} < 0$, o movimento só é possível dentro das curvas de Hill.

Considere-se $r_2 \rightarrow 0$ e, então, $r_1 \rightarrow 1$. De forma análoga ao caso anterior, as curvas de Hill com forma aproximadamente circular têm raio

$$r_z = r_2 \approx \frac{2\mu}{C},$$

e o movimento só é possível dentro do círculo.

Em síntese, quando $C > C_2$, há três regiões possíveis para o movimento: dentro da curva de Hill centrada no primário com maior massa, dentro da curva de Hill centrada no primário com menor massa, e uma terceira, exterior à curva de Hill que engloba os dois primários. Note-se que estas regiões não se intersectam, já que, para $0 \leq \mu \leq \frac{1}{2}$ e $C > 3$,

$$C^{\frac{1}{2}} > \frac{2(1-\mu)}{C},$$

ou seja, a curva de Hill que engloba os dois primários também contém, no seu interior, as outras duas, que são mutuamente exclusivas entre si.

Curvas de Hill ovais e com forma de pêra: $C_1 < C < C_2$

Quando o valor de C diminui, o tamanho das curvas de Hill à volta de m_1 e m_2 ,

$$r_1 \approx \frac{2(1-\mu)}{C}$$

e

$$r_2 \approx \frac{2\mu}{C},$$

respectivamente, aumenta, ao passo que

$$r_z \approx C^{\frac{1}{2}}$$

diminui. Como, para $0 \leq \mu \leq \frac{1}{2}$,

$$\Omega(L_2) > \Omega(L_1) > \Omega(L_3),$$

então, quando C se reduz no intervalo $C > 2\Omega(L_2) = C_2$, o primeiro valor crítico que assume é C_2 .

Quando $C = C_2$, a curva de Hill $r_z = C_2^{\frac{1}{2}}$ mantém as suas características: engloba os dois primários, as curvas de Hill $r_1 = \frac{2(1-\mu)}{C_2}$ e $r_2 = \frac{2\mu}{C_2}$, além de todos os pontos de equilíbrio. As

outras duas curvas de Hill aumentam e encontram-se no ponto L_2 , formando-se uma figura em forma de oito invertido. O movimento admissível é dentro da curva em forma de oito invertido e fora da curva $r_z = C_2^{\frac{1}{2}}$.

A redução do valor de C para valores menores do que C_2 , mas ainda superiores a C_1 , transforma a curva de Hill em forma de oito invertido numa curva em formato de pêra; de facto, as curvas de Hill não cruzam o eixo das abcissas entre m_1 e m_2 . No intervalo $C_1 < C < C_2$, o movimento é possível dentro da figura em forma de pêra (a qual contém dentro de si m_1 , m_2 e L_2 , mas não L_1 nem L_3) e fora da curva de Hill exterior (a qual exibirá uma indentação próximo de L_1). Quando $C = C_1$, a figura em forma de pêra e a curva de Hill exterior intersectam-se no ponto L_1 .

Curvas de Hill com forma de pata de cavalo: $C_3 < C < C_1$

No intervalo $C_3 < C < C_1$, o ponto L_1 deixa de pertencer à curva de Hill, e a figura em forma de pêra no interior da curva de Hill $r_z = C_2^{\frac{1}{2}}$, com um ponto comum em L_1 , dá lugar a uma única curva de Hill com forma de pata de cavalo.

A série de curvas de Hill com forma de pata de cavalo inicia-se quando $C = C_1$ com um *cusp* a formar-se nesse ponto e termina quando se forma um *cusp* em L_3 . O movimento é admissível fora da a curva de Hill, isto é, fora da área contida pela pata de cavalo.

Curvas de Hill em forma de girino: $C_5 = C_4 < C < C_3$

Quando C assume um valor abaixo de C_3 , o *cusp* desaparece com o afastamento da curva de Hill de L_3 . A série de curvas de Hill que se sucede tem dois ramos, sendo que um engloba L_4 e o outro engloba L_5 . Estas curvas encolhem-se à volta desses pontos, à medida que $C \rightarrow 3$, o valor mínimo possível para C . O formato aproximado das curvas para C muito próximo de 3 é elíptico, com o centro da elipse localizado em L_4 (L_5). A orientação e a excentricidade da elipse depende unicamente do valor de μ , enquanto que o tamanho da elipse depende, também, do valor de C .

O movimento é possível fora das curvas de Hill com forma de girino.

A figura 5.2 ilustra algumas curvas de Hill, no caso do problema restrito, para diferentes valores de C .

5.3.7 Soluções periódicas

Os cinco pontos de equilíbrio L_1, \dots, L_5 representam cinco soluções particulares do problema restrito. Estes pontos lagrangianos podem ser obtidos procurando-se soluções da forma $x = \text{const}$,

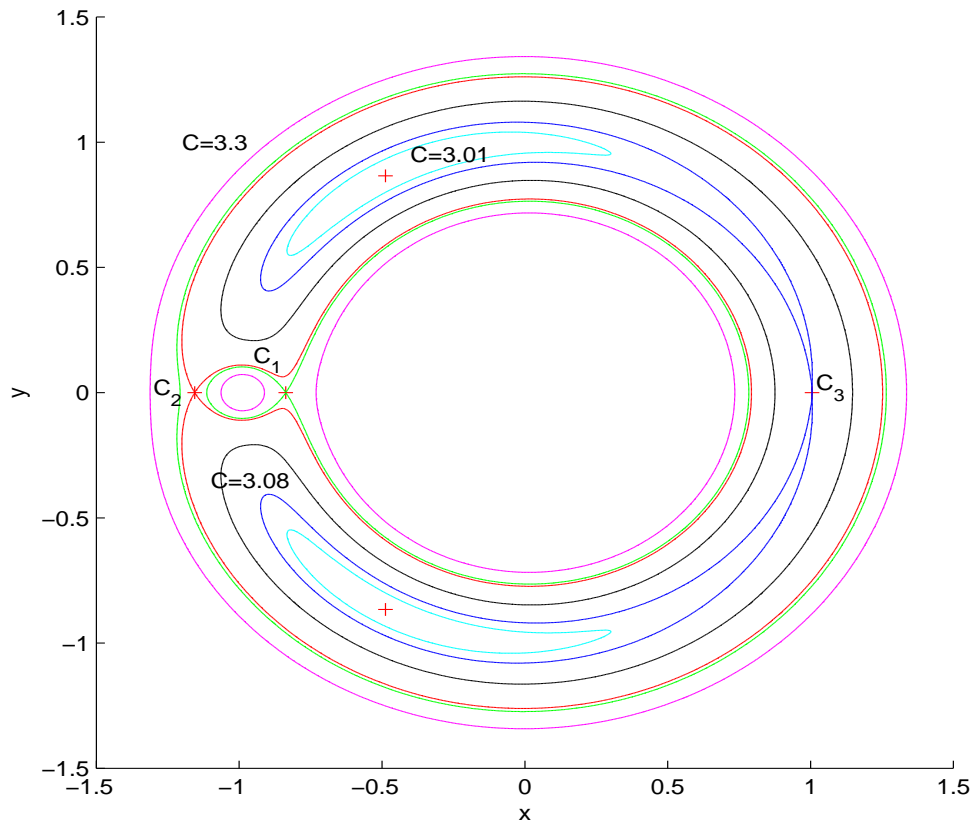


Figura 5.2: Curvas de Hill para o problema restrito, com $\mu = \frac{1}{82.27}$

$y = \text{const.}$ Neste caso, tem-se $\Omega_x = \Omega_y = 0$.

Mas estes pontos não são as únicas soluções das equações do movimento; na vizinhança destes pontos existem outras famílias de soluções. Por exemplo, Lagrange pensou que estas soluções não tinham importância em astronomia; no entanto, descobriu-se que o Sol, Júpiter e os pequenos planetas do grupo dos Troianos formam, aproximadamente, um triângulo equilátero, pelo que tem interesse o estudo das soluções do problema dos três corpos, próximas das soluções de Lagrange.

Actualmente, a investigação e estudo dos pontos estacionários tem registado um interesse acrescido, devido ao número significativo de missões espaciais que usam esses pontos. Por exemplo, se uma nave está localizada num ponto estacionário, ela lá permanecerá; mas, o que acontecerá à nave se ela estiver localizada próximo de um desses pontos? A teoria da estabilidade linear permite responder a esta questão.

Prova-se a existência de soluções periódicas nas proximidades das órbitas circulares de Lagrange [37, 42, 45].

Para se estudar o movimento na vizinhança dos pontos de equilíbrio $L(a, b)$, considera-se

$$x = a + \xi \quad \text{e} \quad y = b + \eta, \quad (5.76)$$

onde ξ e η são coordenadas relativas a L . Para os pontos colineares $L_{1,2,3}$, tem-se $a = x_{1,2,3}$, $b = 0$ e para os pontos triangulares $L_{4,5}$, tem-se $a = \mu - \frac{1}{2}$, $b = \pm \frac{3^{\frac{1}{2}}}{2}$.

A função Ω pode ser expandida à volta de L ,

$$\Omega = \Omega(a, b) + \Omega_x(a, b)\xi + \Omega_y(a, b)\eta + \frac{1}{2}\Omega_{xx}(a, b)\xi^2 + \Omega_{xy}(a, b)\xi\eta + \frac{1}{2}\Omega_{yy}(a, b)\eta^2 + O(3), \quad (5.77)$$

e as equações do movimento 5.45 e 5.46 transformam-se em

$$\begin{aligned} \ddot{\xi} - 2\dot{\eta} &= \Omega_{xx}(a, b)\xi + \Omega_{xy}(a, b)\eta + O(2) \\ \ddot{\eta} + 2\dot{\xi} &= \Omega_{xy}(a, b)\xi + \Omega_{yy}(a, b)\eta + O(2), \end{aligned} \quad (5.78)$$

chamadas equações variacionais.

A equação característica de 5.78 é

$$\lambda^4 + (4 - \Omega_{xx}^0 - \Omega_{yy}^0)\lambda^2 + \Omega_{xx}^0\Omega_{yy}^0 - (\Omega_{xy}^0)^2 = 0, \quad (5.79)$$

onde as derivadas parciais são avaliadas no ponto de equilíbrio,

$$\Omega_{\alpha\beta}^0 = \Omega_{\alpha\beta}(a, b).$$

Movimento na vizinhança dos pontos colineares

Considere-se $0 < \mu < \frac{1}{2}$. A equação característica 5.79 nos três pontos de equilíbrio colineares tem duas raízes reais simétricas e duas raízes imaginárias puras conjugadas.

Como a solução das equações variacionais é da forma

$$\begin{aligned} \xi &= \sum_{i=1}^4 A_i e^{\lambda_i t} \\ \eta &= \sum_{i=1}^4 B_i e^{\lambda_i t}, \end{aligned} \quad (5.80)$$

em geral existe sempre um termo que dá valores ilimitados para ξ e η , à medida que $t \rightarrow \infty$ (corresponde à raiz λ real positiva); então, a solução é instável. Os pontos de equilíbrio colineares são soluções instáveis, tanto no caso da linearização do sistema como no caso da presença de termos não lineares. No entanto, existem trajectórias que movem o terceiro corpo na direcção dos pontos lagrangianos [45]. Em particular, relativamente aos pontos L_1 e L_2 , o teorema de

Liapunov afirma que existe uma família de órbitas periódicas à volta desses pontos. No caso plano, essas órbitas são designadas por órbitas de Liapunov e, no caso espacial, por órbitas de Lissajous [27].

Os coeficientes A_1, \dots, A_4 e B_1, \dots, B_4 não são independentes, mas tais que

$$(\lambda_i^2 - \Omega_{xx}^0)A_i = (2\lambda_i + \Omega_{xy}^0)B_i, \quad (5.81)$$

e então as quatro condições iniciais das equações variacionais 5.78 determinam os oito coeficientes. Os coeficientes são dados por

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{e^{-\lambda_1 t_0}}{\lambda_1^2 - \lambda_3^2} (-\xi_0 \alpha_3 \lambda_3 - \dot{\xi}_0 \alpha_3 \delta + \eta_0 \lambda_3 \delta + \dot{\eta}_0) \\ A_2 &= \frac{e^{\lambda_1 t_0}}{\lambda_1^2 - \lambda_3^2} (-\xi_0 \alpha_3 \lambda_3 + \dot{\xi}_0 \alpha_3 \delta - \eta_0 \lambda_3 \delta + \dot{\eta}_0) \\ A_3 &= \frac{e^{-\lambda_3 t_0}}{\lambda_1^2 - \lambda_3^2} (\xi_0 \alpha_1 \lambda_1 + \dot{\xi}_0 \alpha_1 \delta - \eta_0 \lambda_1 \delta - \dot{\eta}_0) \\ A_4 &= \frac{e^{\lambda_3 t_0}}{\lambda_1^2 - \lambda_3^2} (\xi_0 \alpha_1 \lambda_1 - \dot{\xi}_0 \alpha_1 \delta + \eta_0 \lambda_1 \delta - \dot{\eta}_0), \end{aligned} \quad (5.82)$$

onde

$$\alpha_i = \frac{\Lambda_i^2 - \Omega_{xx}^0}{2\lambda_i} \quad (5.83)$$

e

$$\delta = \left(\frac{\Omega_{yy}^0}{\Omega_{xx}^0} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.84)$$

Movimento na vizinhança dos pontos triangulares

A equação característica para os pontos L_4 e L_5 é

$$\lambda^4 + \lambda^2 + \frac{27}{4}\mu(1 - \mu) = 0, \quad (5.85)$$

com raízes $\lambda_{1,2} = \pm \Lambda_1^{\frac{1}{2}}$ e $\lambda_{3,4} = \pm \Lambda_2^{\frac{1}{2}}$, onde $\Lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left(-1 \pm \sqrt{1 - 27\mu(1 - \mu)} \right)$.

A estabilidade depende do sinal de $1 - 27\mu(1 - \mu)$, existindo três casos diferentes. As suas raízes são $\mu_0 = 0,03852\dots$ e $1 - \mu_0$.

1. No caso de $0 \leq \mu < \mu_0$, o movimento é limitado, sendo a sobreposição de duas oscilações harmónica com frequências diferentes, existindo estabilidade no sentido linear. O comportamento do sistema não linear não pode ser predito, já que as raízes imaginárias são puras, sendo necessária investigação adicional.

As raízes da equação característica são todas imaginários puros e a solução das equações variacionais é

$$\begin{aligned}\xi &= C_1 \cos s_1 t + S_1 \sin s_1 t + C_2 \cos s_2 t + S_2 \sin s_2 t \\ \eta &= \bar{C}_1 \cos s_1 t + \bar{S}_1 \sin s_1 t + \bar{C}_2 \cos s_2 t + \bar{S}_2 \sin s_2 t,\end{aligned}\quad (5.86)$$

onde

$$\begin{aligned}\bar{C}_i &= \Gamma_i(2s_i S_i - \Omega_{xy}^0 C_i) \\ \bar{S}_i &= -\Gamma_i(2s_i C_i + \Omega_{xy}^0 S_i),\end{aligned}\quad (5.87)$$

e

$$\Gamma_i = \frac{1}{s_i^2 + \Omega_{yy}^0}, \quad (5.88)$$

sendo

$$\begin{aligned}s_1 &= -\Lambda_1^{\frac{1}{2}} \\ s_2 &= -\Lambda_2^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}\quad (5.89)$$

As relações entre as condições iniciais e os coeficientes da equação 5.86 são

$$\xi_0 = C_1 + C_2 \quad \eta_0 = \bar{C}_1 + \bar{C}_2 \quad (5.90)$$

e

$$\dot{\xi}_0 = S_1 s_1 + S_2 s_2 \quad \dot{\eta}_0 = \bar{S}_1 s_1 + \bar{S}_2 s_2. \quad (5.91)$$

2. No caso de $\mu_0 < \mu < \frac{1}{2}$, o discriminante da equação característica é negativo; as raízes da equação característica são

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-1 + i\delta)^{\frac{1}{2}} = \alpha_1 + i\beta_1 \\ \lambda_2 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(-1 + i\delta)^{\frac{1}{2}} = \alpha_2 + i\beta_2 \\ \lambda_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-1 - i\delta)^{\frac{1}{2}} = \alpha_3 + i\beta_3 \\ \lambda_4 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(-1 - i\delta)^{\frac{1}{2}} = \alpha_4 + i\beta_4,\end{aligned}\quad (5.92)$$

onde $\delta = \sqrt{27\mu(1-\mu) - 1}$.

As partes reais e imaginárias das raízes, α_i e β_i , obedecem às relações

$$\alpha = \alpha_1 = -\alpha_2 = \alpha_3 = -\alpha_4$$

e

$$\beta = \beta_1 = -\beta_2 = -\beta_3 = \beta_4$$

onde

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{\sqrt{[27\mu(1-\mu)]^{\frac{1}{2}} - 1}}{2} \\ \beta &= \frac{\sqrt{[27\mu(1-\mu)]^{\frac{1}{2}} + 1}}{2}.\end{aligned}\tag{5.93}$$

Como a parte real de duas das raízes da equação característica são positivas, então o ponto de equilíbrio é instável. A natureza deste resultado também é válida no caso não linear.

3. Quando $\mu = \mu_0$, então $1 - 27\mu(1 - \mu) = 0$ e, então $\lambda_1 = \lambda_3 = \frac{i}{\sqrt{2}}$ e $\lambda_2 = \lambda_4 = -\frac{i}{\sqrt{2}}$, sendo o ponto de equilíbrio instável.

5.3.8 Modificações ao problema restrito

A definição do problema restrito dos três corpos apresentada especifica um movimento circular para m_1 e m_2 e, também, exige que o movimento de m_3 esteja no plano definido pelo movimento de m_1 e m_2 . Este cenário tem algumas modificações pertinentes, enunciadas de seguida.

1. O problema de Hill, tratado na secção seguinte.
2. O movimento de m_1 e m_2 pode não ser circular. Então, no caso das forças gravitacionais de Newton figurarem no problema dos dois corpos m_1 e m_2 , e dependendo das condições iniciais, as soluções podem ser secções cónicas. O caso de m_1 e m_2 terem órbitas elípticas é relevante, com algumas aplicações, e é designado por problema restrito elíptico.
3. O movimento de m_3 pode não estar no plano do movimento de m_1 e m_2 . Este cenário alternativo surge quando as condições iniciais do terceiro corpo são tais que o corpo não está no plano definido pelo movimento dos outros dois corpos, ou então, quando o vector velocidade inicial tem uma componente que não está nesse plano.
4. Considere-se $\mu_1 = \mu$, com $\mu_2 = 1 - \mu$. No caso limite de $\mu = 0$, o problema restrito dos três corpos transforma-se no problema dos dois corpos; então, problemas com valores de μ muito pequenos podem ser encarados como perturbações ao problema dos dois corpos. Se $\mu = \frac{1}{2}$ é, tipicamente, um problema de três corpos e, neste caso particular, conhecido pelo problema de Copenhaga.
5. As massas dos primários podem variar ao longo do tempo, implicando uma modificação profunda nas equações do movimento.

6. As forças que figuram no problema podem não ser forças centrais e, neste caso, será de questionar o movimento circular dos primários.

5.4 O problema de Hill

O problema de Hill é um caso particular do problema restrito dos três corpos, considerando a Terra e o Sol como primários. Hill assumiu as seguintes simplificações:

1. a paralaxe solar é nula;
2. a excentricidade solar é nula;
3. a inclinação lunar é nula.

As soluções das equações do movimento que descrevem este sistema são soluções periódicas, num sistema de coordenadas que roda com velocidade angular uniforme igual ao movimento do Sol.

5.4.1 As equações do movimento

Considerem-se as equações do movimento no sistema de coordenadas sinódico, com variáveis adimensionais 5.53 e 5.54

$$\begin{aligned} \ddot{x} - 2\dot{y} &= x - \frac{(1-\mu)(x-\mu)}{r_1^3} - \frac{\mu(x+1-\mu)}{r_2^3} \\ \ddot{y} + 2\dot{x} &= y \left(1 - \frac{1-\mu}{r_1^3} - \frac{\mu}{r_2^3} \right). \end{aligned} \quad (5.94)$$

A aceitação destas equações do movimento como ponto de partida da derivação das equações do movimento do problema de Hill já implica, por si só, a assumpção da excentricidade solar nula, uma vez que se assume que as órbitas dos primários são circulares.

A hipótese da inclinação lunar é nula não é usada num problema bidimensional, como é o caso. No entanto, num problema tridimensional, com um sistema centrado na Terra, sendo (X, Y, Z) as coordenadas da Lua, esta simplificação tomava forma na assumpção do plano (X, Y) como o plano da eclíptica.

Para deduzir as equações do movimento do problema de Hill, procede-se como se segue:

- (i) aplica-se uma translação às equações 5.94 ao longo do eixo das abcissas, de forma a localizar o primário de massa menor μ na origem do sistema;
- (ii) a unidade de distância é mudada pela introdução de μ^α como factor de reescalamto;

- (iii) obtêm-se umas equações do movimento que indicam que, se $\alpha = \frac{1}{3}$, então a força gravitacional da Terra é da mesma ordem de magnitude da força de Coriolis e da força centrífuga;
- (iv) faz-se $\mu \rightarrow 0$, obtendo-se as equações do movimento do problema de Hill.

Aplicar-se uma translação ao longo do eixo das abcissas dada por

$$\begin{aligned}\xi &= x + 1 - \mu \\ \eta &= y.\end{aligned}\tag{5.95}$$

O primário de menor massa μ fica localizado na origem do novo sistema, $P_2(\xi = 0, \eta = 0)$ e o outro primário fica no ponto $P_1(\xi = 1, \eta = 0)$. Tal significa que o novo sistema de coordenadas está centrado na Terra e que o Sol, localizado no eixo ξ , dista da Terra uma unidade de distância. As equações do movimento 5.94 transformam-se em

$$\begin{aligned}\ddot{\xi} - 2\dot{\eta} &= \xi + \mu - 1 - \frac{(1 - \mu)(\xi - 1)}{r_1^3} - \frac{\mu\xi}{r_2^3} \\ \ddot{\eta} + 2\dot{\xi} &= \eta \left(1 - \frac{1 - \mu}{r_1^3} - \frac{\mu}{r_2^3} \right).\end{aligned}\tag{5.96}$$

As distâncias r_1 e r_2 não se alteram com esta transformação, mas somente as suas expressões, que agora são dadas por

$$\begin{aligned}r_1 &= [(x - \mu)^2 + y^2]^{\frac{1}{2}} \\ &= [(\xi - 1)^2 + \eta^2]^{\frac{1}{2}},\end{aligned}\tag{5.97}$$

e

$$\begin{aligned}r_2 &= [(x - \mu + 1)^2 + y^2]^{\frac{1}{2}} \\ &= (\xi^2 + \eta^2)^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}\tag{5.98}$$

De seguida, é feito um reescalamiento de acordo com

$$\bar{\xi} = \frac{\xi}{\mu^\alpha}\tag{5.99}$$

e

$$\bar{\eta} = \frac{\eta}{\mu^\alpha}.\tag{5.100}$$

As equações do movimento 5.96 são, após divisão por μ^α , transformadas em :

$$\begin{aligned}\ddot{\bar{\xi}} - 2\dot{\bar{\eta}} &= \bar{\xi} + (\mu - 1)\mu^{-\alpha} + \frac{(\mu - 1)\mu^{-\alpha}(\mu^\alpha\bar{\xi} - 1)}{\bar{r}_1^3} - \frac{\mu\bar{\xi}}{\bar{r}_2^3} \\ \ddot{\bar{\eta}} + 2\dot{\bar{\xi}} &= \bar{\eta} \left(1 - \frac{1 - \mu}{\bar{r}_1^3} - \frac{\mu}{\bar{r}_2^3} \right),\end{aligned}\quad (5.101)$$

onde

$$\begin{aligned}\bar{r}_1 &= [(\bar{\xi}\mu^\alpha - 1)^2 + \bar{\eta}^2\mu^{2\alpha}]^{\frac{1}{2}} \\ &= [(\bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2)\mu^{2\alpha} - 2\mu^\alpha\bar{\xi} + 1]^{\frac{1}{2}}\end{aligned}\quad (5.102)$$

e

$$\bar{r}_2 = \mu^\alpha(\bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2)^{\frac{1}{2}}.\quad (5.103)$$

Substituindo as equações 5.102 e 5.103 em 5.101, obtêm-se as equações

$$\begin{aligned}\ddot{\bar{\xi}} - 2\dot{\bar{\eta}} &= \bar{\xi} + (\mu - 1)\mu^{-\alpha} + \frac{(\mu - 1)\mu^{-\alpha}(\mu^\alpha\bar{\xi} - 1)}{[(\bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2)\mu^{2\alpha} - 2\mu^\alpha\bar{\xi} + 1]^{\frac{3}{2}}} - \frac{\bar{\xi}\mu^{1-3\alpha}}{(\bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2)^{\frac{3}{2}}} \\ \ddot{\bar{\eta}} + 2\dot{\bar{\xi}} &= \bar{\eta} \left(1 - \frac{1 - \mu}{[(\bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2)\mu^{2\alpha} - 2\mu^\alpha\bar{\xi} + 1]^{\frac{3}{2}}} - \frac{\mu^{1-3\alpha}}{(\bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2)^{\frac{3}{2}}} \right).\end{aligned}\quad (5.104)$$

Agora, considera-se $\alpha = \frac{1}{3}$, de forma a que os termos de Coriolis $-2\dot{\bar{\eta}}$ e $2\dot{\bar{\xi}}$, os termos da força centrífuga $\bar{\xi}$ e $\bar{\eta}$, e os termos gravitacionais associados à Terra $\frac{\bar{\xi}}{(\bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2)^{\frac{3}{2}}}$ e $\frac{\bar{\eta}}{(\bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2)^{\frac{3}{2}}}$, tenham a mesma ordem de magnitude.

Por fim, considere-se $\mu \rightarrow 0$, ou seja, assume-se que a paralaxe solar é nula. Os únicos termos afectados por este limite na equação 5.104 são o segundo e o terceiro termo do segundo membro da primeira equação e o segundo termo do segundo membro da segunda equação.

Os dois termos da primeira equação podem ser escritos como

$$\frac{\mu - 1}{\mu^\alpha} \left(\frac{\bar{r}_1^3 - 1 + \mu^\alpha\bar{\xi}}{\bar{r}_1^3} \right) = (\mu - 1) \frac{\bar{\xi}}{\bar{r}_1^3} + \frac{\mu - 1}{\bar{r}_1^3} \frac{\bar{r}_1^3 - 1}{\mu^\alpha}.$$

Então,

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} (\mu - 1) \frac{\bar{\xi}}{\bar{r}_1^3} + \frac{\mu - 1}{\bar{r}_1^3} \frac{\bar{r}_1^3 - 1}{\mu^\alpha} = -\bar{\xi} + 3\bar{\xi} = 2\bar{\xi},$$

pela utilização de 5.102.

O limite do segundo termo do segundo membro da equação 5.104 é igual a 1, já que $\bar{r}_1 \rightarrow 1$ quando $\mu = 0$.

As equações do movimento 5.104 transformam-se em

$$\begin{aligned}\ddot{\bar{\xi}} - 2\dot{\bar{\eta}} &= 3\bar{\xi} - \frac{\bar{\xi}}{(\bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2)^{\frac{3}{2}}} \\ \ddot{\bar{\eta}} + 2\dot{\bar{\xi}} &= -\frac{\bar{\eta}}{(\bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2)^{\frac{3}{2}}}.\end{aligned}\quad (5.105)$$

As equações do movimento 5.105 podem ser reescritas pela introdução de uma função potencial

$$\Omega^* = \frac{1}{2}\left(3\bar{\xi}^2 + \frac{2}{\bar{r}}\right), \quad (5.106)$$

onde

$$\bar{r} = (\bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2)^{\frac{1}{2}},$$

obtendo-se

$$\begin{aligned}\ddot{\bar{\xi}} - 2\dot{\bar{\eta}} &= \frac{\partial \Omega^*}{\partial \bar{\xi}} \\ \ddot{\bar{\eta}} + 2\dot{\bar{\xi}} &= \frac{\partial \Omega^*}{\partial \bar{\eta}}.\end{aligned}\quad (5.107)$$

O integral do movimento é

$$\dot{\bar{\xi}}^2 + \dot{\bar{\eta}}^2 = 2\Omega^* - C. \quad (5.108)$$

Equações de Euler-Lagrange

As equações 5.105 correspondem às equações de Euler-Lagrange 2.4. Considere-se a Lagrangiana [40]

$$L = \frac{\dot{x}^2 + \dot{y}^2}{2} + (xy - y\dot{x}) - V(x, y), \quad (5.109)$$

onde

$$V = -\frac{3}{2} - \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}}.$$

Seguindo 2.4, obtêm-se as equações

$$\begin{aligned}\ddot{x} - 2\dot{y} &= -\frac{\partial V}{\partial x} \\ \ddot{y} + 2\dot{x} &= -\frac{\partial V}{\partial y},\end{aligned}\quad (5.110)$$

análogas a 5.105.

5.4.2 Equações hamiltonianas do movimento

A hamiltoniana do problema de Hill é [37]:

$$H = \frac{1}{2} \|\mathbf{p}\|^2 - \mathbf{q}^T \mathbf{J} \mathbf{p} - \frac{1}{\|\mathbf{q}\|} - x^2 + \frac{1}{2} y^2, \quad (5.111)$$

onde $\mathbf{p} = (p_x, p_y)^T$ e $\mathbf{q} = (x, y)^T$, sendo

$$\begin{aligned} p_x &= \dot{x} - y \\ p_y &= \dot{y} + x, \end{aligned} \quad (5.112)$$

de acordo com 2.5.

As equações hamiltonianas do movimento, da forma 2.7, são

$$\begin{aligned} \dot{x} &= p_x + y \\ \dot{y} &= p_y - x, \end{aligned} \quad (5.113)$$

e

$$\begin{aligned} \dot{p}_x &= p_y + 2x - \frac{x}{(x^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}} \\ \dot{p}_y &= -p_x - y - \frac{y}{(x^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}}. \end{aligned} \quad (5.114)$$

5.4.3 Equações do movimento em função de variáveis complexas conjugadas

Considerem-se as equações 5.69 e 5.70. Para se obter uma solução periódica, introduz-se uma simplificação devido a Hill.

Seja P_2 o Sol, P_1 a Terra e P_3 a Lua. A massa μ da Terra é pequena relativamente à massa $1 - \mu$ do Sol; o Sol e a Terra movem-se em volta do seu centro de massa comum, aproximadamente, em circunferências, enquanto que a Lua não se afasta muito do plano que contém essas circunferências. Além disso, a massa da Lua é pequena em relação à massa da Terra, pelo que se considera $m_3 = 0$.

O objectivo é procurar uma solução periódica das equações do movimento 5.69 e 5.70 para valores pequenos de μ . Como $|p|$ corresponde à distância entre a Lua e a Terra, que é pequena relativamente à distância entre o Sol e a Terra, faz sentido determinar uma solução periódica para a qual $|p|$ seja pequeno. Numa primeira aproximação desprezam-se os termos $-2i\dot{p}$, $2i\dot{q}$ de 5.69 e 5.70, respectivamente, e mantém-se na expressão de G , em 5.68, apenas o termo $\frac{2\mu}{\sqrt{qp}}$.

Obtem-se o sistema

$$\begin{aligned}\ddot{p} &= -\mu p(pq)^{-\frac{3}{2}} \\ \ddot{q} &= -\mu q(pq)^{-\frac{3}{2}}.\end{aligned}\tag{5.115}$$

Uma solução particular destas equações é $p = \mu^{\frac{1}{3}}e^{it}$, $q = \bar{p} = \mu^{\frac{1}{3}}e^{-it}$, $|p| = |q| = \mu^{\frac{1}{3}}$. A mudança de variáveis adequada é

$$p = \mu^{\frac{1}{3}}u, \quad q = \mu^{\frac{1}{3}}v,$$

e então, as equações do movimento 5.69 e 5.70 transformam-se em

$$\begin{aligned}\ddot{u} &= -2i\dot{u} + N_v \\ \ddot{v} &= 2i\dot{v} + N_u,\end{aligned}\tag{5.116}$$

onde $N = \mu^{-\frac{2}{3}}G$. O desenvolvimento de N em potências de $\mu^{\frac{1}{3}}$ é

$$N = 2\mu^{-\frac{2}{3}} + \frac{3}{4}(u+v)^2 + 2(uv)^{-\frac{1}{2}} + \dots$$

onde os termos restantes contêm apenas potências positivas de $\mu^{\frac{1}{3}}$. Como se admite μ pequeno, desprezam-se esses termos adicionais e as equações do movimento 5.116 transformam-se em

$$\begin{aligned}\ddot{u} &= -2i\dot{u} + \frac{3}{2}(u+v) - u(uv)^{-\frac{3}{2}} \\ \ddot{v} &= 2i\dot{v} + \frac{3}{2}(u+v) - v(uv)^{-\frac{3}{2}},\end{aligned}\tag{5.117}$$

conhecidas como equações diferenciais de Hill.

Mesmo neste caso, não se conhece a solução geral. É possível determinar soluções periódicas destas equações do movimento por meio de um desenvolvimento em série de potências [42].

5.4.4 Pontos de equilíbrio e a função $\Omega(x, y)$

Por uma questão de simplicidade de escrita, use-se a notação x, y, Ω no lugar de $\bar{\xi}, \bar{\eta}, \Omega^*$, respectivamente.

O integral do movimento do problema de Hill é

$$\dot{x}^2 + \dot{y}^2 = 2\Omega - C,\tag{5.118}$$

onde

$$\Omega = \frac{3}{2}x^2 + \frac{1}{r}.\tag{5.119}$$

Quanto à função $\Omega(x, y)$, pode afirmar-se o seguinte. No caso de $x \neq 0$, quando $r \rightarrow \infty$, tem-se que $\Omega \rightarrow \infty$. No caso de $x = 0$, quando $r \rightarrow \infty$, tem-se que $\Omega \rightarrow 0$. Tal significa que, em qualquer direcção, excepto no eixo das ordenadas, $\Omega \rightarrow \infty$; no eixo dos yy , a função Ω tende para zero, à medida que $r \rightarrow \infty$.

As singularidades da variedade dos estados do movimento são determinadas a partir das equações

$$\begin{aligned} \dot{x} &= 0 \\ \dot{y} &= 0 \\ \Omega_x &= x\left(3 - \frac{1}{r^3}\right) = 0 \\ \Omega_y &= -\frac{y}{r^3} = 0. \end{aligned} \tag{5.120}$$

Os pontos de equilíbrio são a solução das equações 5.120. Os pontos colineares são $L_1(-3^{-\frac{1}{3}}, 0)$ e $L_2(3^{-\frac{1}{3}}, 0)$. O terceiro ponto colinear L_3 não existe no problema de Hill; no problema restrito, L_3 estava localizado à direita do primário com maior massa e, no problema de Hill, m_1 moveu-se para $x = +\infty$.

Os pontos colineares L_1 e L_2 são pontos sela [45]. As matrizes associadas com a linearização das equações de Hamilton na vizinhança de cada ponto de equilíbrio, têm um par de valores próprios reais simétricos ($\pm\sqrt{2\sqrt{7}+1}$) e dois pares de valores próprios imaginários puros conjugados ($\pm 2i, \pm\sqrt{2\sqrt{7}-1}i$) [46].

5.4.5 Curvas de Hill e as regiões do movimento

As curvas de Hill são

$$3x^2 + \frac{2}{r} - C = 0, \tag{5.121}$$

onde se observa uma simetria com respeito ao eixo do x e do y .

As curvas de Hill intersectam o eixo das abcissas quando $C \geq 3^{\frac{4}{3}}$.

Existem três tipos diferentes de curvas de Hill, conforme $C > 3^{\frac{4}{3}}$, $C = 3^{\frac{4}{3}}$ ou $C < 3^{\frac{4}{3}}$.

Curvas de Hill para $C > 3^{\frac{4}{3}}$

As curvas de Hill têm duas formas diferentes: ovais em torno da origem e compostas por dois ramos infinitos. O movimento é possível dentro das curvas ovais e nos lados côncavos dos ramos infinitos.

Para o movimento da Lua, só interessa este caso $C > 3^{\frac{4}{3}}$, no qual o movimento só é admissível dentro da região oval fechada à volta da origem.

Curvas de Hill para $C = 3^{\frac{4}{3}}$

Quando $C = 3^{\frac{4}{3}}$, as curvas ovais e os ramos infinitos intersectam-se nos pontos L_1 e L_2 . As regiões do movimento são semelhantes ao caso anterior.

Curvas de Hill para $C < 3^{\frac{4}{3}}$

As curvas de Hill têm a forma apresentada na figura 5.3. As regiões proibidas ao movimento são

$$|y| > \left[\left(\frac{2}{C - 3x^2} \right)^2 - x^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5.122)$$

e

$$|x| < \left(\frac{C}{3} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.123)$$

A figura 5.3 ilustra as curvas de Hill, no problema de Hill, para diferentes valores de C .

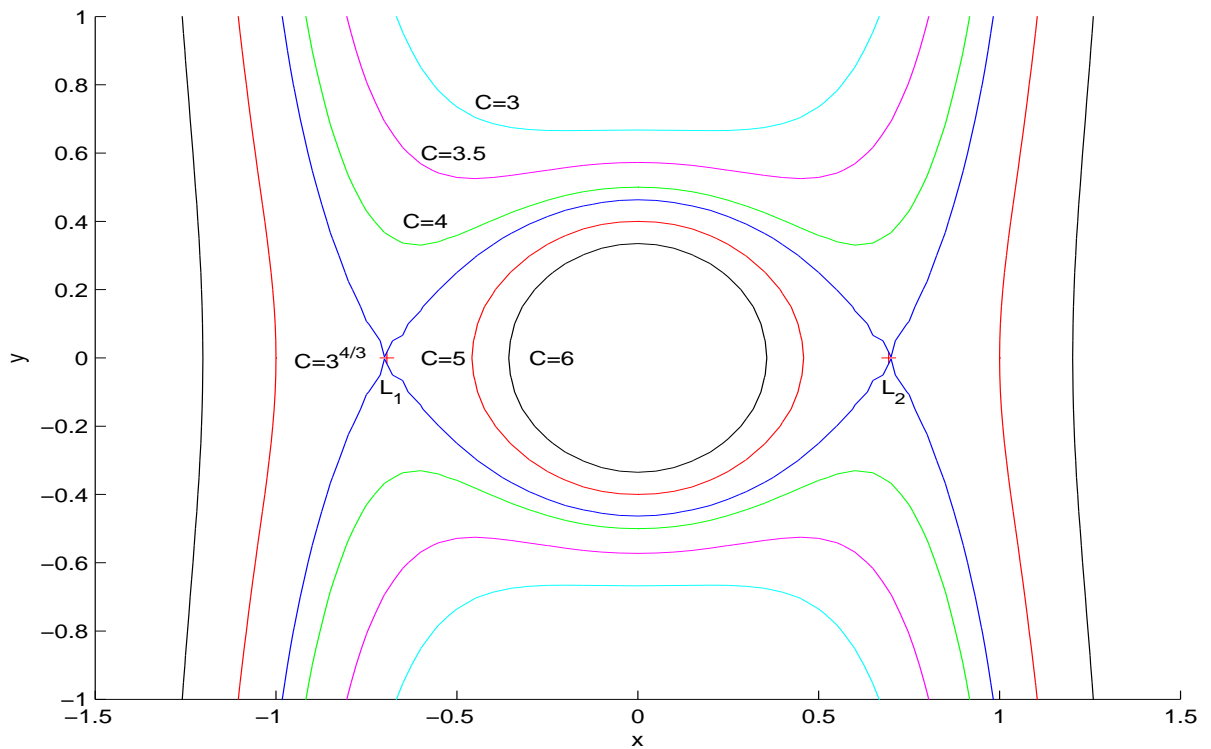


Figura 5.3: Curvas de Hill para o problema de Hill

Capítulo 6

Integração numérica do problema de Hill

O problema de Hill é um problema não integrável [34]. Consequentemente, faz todo o sentido a sua integração recorrendo a métodos numéricos.

Para integrar numericamente o problema de Hill vão utilizar-se métodos clássicos e métodos incluídos na classe dos integradores geométricos, procedendo-se a uma análise comparativa. Numa primeira fase, faz-se o contraste entre os métodos convencionais e os métodos simpléticos, característica qualitativa essencial a preservar pelo método numérico na integração de sistemas hamiltonianos. Numa fase subsequente, comparam-se entre si os métodos simpléticos com passo de integração fixo, nomeadamente um integrador de ordem 1 e outro de ordem 2, ambos explícitos, com um terceiro integrador de ordem 2, mas implícito. Numa fase posterior, comparam-se os resultados numéricos obtidos por integradores geométricos com passo de integração constante, com os resultados obtidos pelos integradores geométricos com passo adaptativo.

Estas comparações e contrastes serão feitos para dois valores distintos da constante de Jacobi C , sendo um deles no intervalo $C > 3^{\frac{4}{3}}$ e o outro no intervalo $C < 3^{\frac{4}{3}}$, já que dão origem a curvas de Hill com natureza diferente; no primeiro caso, o movimento está limitado à região contida numa curva oval e, no segundo caso, o terceiro corpo pode escapar-se.

Os integradores clássicos, não geométricos, com passo de integração fixo, utilizados na integração numérica são o método de Euler explícito, o método de Euler implícito e o método Runge-Kutta de ordem 4. Os métodos geométricos com passo de integração constante utilizados são o método de Euler simplético, a regra do ponto médio implícita e o método Störmer-Verlet geral (para sistemas com função Hamiltoniana não separável). Os integradores com passo adaptativo utilizados foram o método de Euler simplético e o método Störmer-Verlet.

Antes de iniciar a exposição dos resultados, sumarize-se a função Hamiltoniana do problema de Hill e as respectivas equações do movimento.

A Hamiltoniana do problema de Hill é

$$H = \frac{1}{2}\|\mathbf{p}\|^2 - \mathbf{q}^T \mathbf{J} \mathbf{p} - \frac{1}{\|\mathbf{q}\|} + \frac{1}{2} \mathbf{q}^T \mathbf{A} \mathbf{q},$$

onde a matriz \mathbf{J} é dada por 2.9 e a matriz \mathbf{A} é dada por

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.1)$$

As equações hamiltonianas do movimento são

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= H_{\mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -H_{\mathbf{q}}, \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} H_p &= \mathbf{p} + \mathbf{J} \mathbf{q} \\ H_q &= \mathbf{J}^T \mathbf{p} + \mathbf{A} \mathbf{q} + \frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|^3}, \end{aligned} \quad (6.2)$$

6.1 Comparação entre métodos simplécticos e não simplécticos, com passo de integração fixo

A integração numérica do problema de Hill será feita para o caso em que a constante de Jacobi pertence ao intervalo $C > 3^{\frac{4}{3}}$. As condições iniciais escolhidas são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, ou seja, o terceiro corpo, no instante $t = 0$, está na curva de Hill. Como $p_x = \dot{q}_1 - q_2$ e $p_y = \dot{q}_2 + q_1$, tem-se que $(p_x, p_y) = (-0.05, 0.45)$ no instante inicial. A constante de Jacobi subjacente é calculada a partir da igualdade

$$C = 3q_1^2 + \frac{2}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}},$$

obtendo-se $C = 5.02476$.

Os métodos não simplécticos com passo de integração fixo utilizados nesta secção são o método de Euler explícito, o método de Euler implícito e o método Runge-Kutta de ordem 4. O método simpléctico utilizado para efectuar a comparação e o contraste com os métodos não simplécticos é o método de Euler simpléctico.

De seguida, apresentam-se estes métodos numéricos aplicados ao problema de Hill.

O método de Euler explícito

O método de Euler explícito para o problema de Hill é expresso da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 q_{n+1} &= q_n + hH_p(q_n, p_n) \\
 &= q_n + h(p_n + Jq_n) \\
 &= (I + hJ)q_n + hp_n \\
 p_{n+1} &= p_n - hH_q(q_n, p_n) \\
 &= p_n - h \left(J^T p_n + Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right).
 \end{aligned} \tag{6.3}$$

onde h representa o passo de integração.

O método de Euler implícito

O método de Euler implícito para o problema de Hill traduz-se da forma que se segue.

$$\begin{aligned}
 q_{n+1} &= q_n + hH_p(q_{n+1}, p_{n+1}) \\
 &= q_n + h(p_{n+1} + Jq_{n+1}) \\
 p_{n+1} &= p_n - hH_q(q_{n+1}, p_{n+1}) \\
 &= p_n - h \left(J^T p_{n+1} + Aq_{n+1} + \frac{q_{n+1}}{\|q_{n+1}\|^3} \right).
 \end{aligned} \tag{6.4}$$

Sejam $\mathbf{y} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})^T$ e $f = (H_p, -H_q)^T$. Para calcular \mathbf{y}_{n+1} , é necessário resolver-se o sistema de equações não lineares dado por

$$G(\mathbf{y}_{n+1}) = \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n - hf(\mathbf{y}_{n+1}) = 0, \tag{6.5}$$

podendo ser usado o método de Newton descrito no apêndice B.

O método Runge-Kutta explícito de ordem 4

O algoritmo pode ser traduzido da forma que se segue.

Sejam $\mathbf{y} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})^T$ e $f = (H_{\mathbf{p}}, -H_{\mathbf{q}})^T$, e considerem-se

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(\mathbf{y}_n) \\ k_2 &= hf\left(\mathbf{y}_n + \frac{1}{2}k_1\right) \\ k_3 &= hf\left(\mathbf{y}_n + \frac{1}{2}k_2\right) \\ k_4 &= hf\left(\mathbf{y}_n + \frac{1}{2}k_3\right). \end{aligned} \tag{6.6}$$

A actualização da posição e do momento é feita a partir da expressão

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4). \tag{6.7}$$

O método de Euler simpléctico

O método de Euler simpléctico pode ser escrito como se segue.

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= q_n + hH_p(q_n, p_{n+1}) \\ p_{n+1} &= p_n - hH_q(q_n, p_{n+1}). \end{aligned} \tag{6.8}$$

Substituindo as expressões 6.2 obtém-se

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= q_n + h(p_{n+1} + Jq_n) \\ p_{n+1} &= p_n - h\left(J^T p_{n+1} + Aq_n + \frac{q_n}{\|q\|^3}\right), \end{aligned} \tag{6.9}$$

onde as matrizes J e A são dadas por 2.9 e 6.1, respectivamente.

Para determinar p_{n+1} , procede-se da forma que se segue.

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n - h(J^T p_{n+1}) - h\left(Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3}\right) \\ \Rightarrow p_{n+1} + hJ^T p_{n+1} &= p_n - h\left(Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3}\right) \\ \Rightarrow (I + hJ^T) p_{n+1} &= p_n - h\left(Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3}\right) \\ \Rightarrow p_{n+1} &= (I + hJ^T)^{-1} \left[p_n - h\left(Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3}\right) \right], \end{aligned}$$

onde

$$(I + hJ^T)^{-1} = \frac{1}{1 + h^2} \begin{pmatrix} 1 & h \\ -h & 1 \end{pmatrix}.$$

6.1.1 Resultados numéricos com os métodos clássicos

Observe-se a figura 6.1, que apresenta a trajetória do terceiro corpo no problema de Hill, sendo a integração feita pelo método de Euler explícito e pelo método de Euler implícito, respectivamente. Sabe-se que para $C > 3^{\frac{4}{3}}$, o movimento está circunscrito à região oval dentro da curva

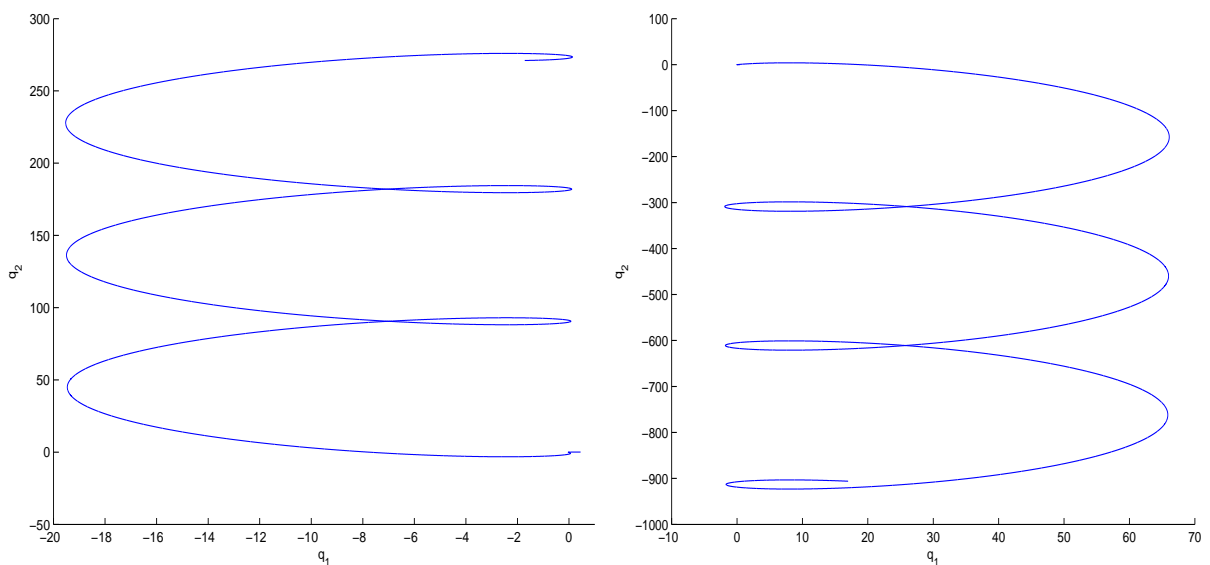


Figura 6.1: Trajetórias do terceiro corpo no problema de Hill, com método de Euler explícito e com o método de Euler implícito, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com passo de integração $h = 10^{-3}$, num total de 20000 passos.

de Hill. Conforme é visível, as trajetórias produzidas por ambos os métodos não reproduzem, nesse sentido, o retrato da fase, já que as trajetórias saem da região do movimento permitidas. Tais resultados não são de estranhar, em virtude de ambos os métodos não serem geométricos, já que não gozam de simplecticidade, característica intrínseca aos sistemas hamiltonianos. Embora estes métodos não sejam adequados para integrar sistemas hamiltonianos no longo prazo, eles podem ser úteis na integração a muito curto prazo. As figuras 6.2 e 6.3 mostram o comportamento da função Hamiltoniana para os primeiros 1000 passos de integração, e a evolução no erro dessa função para os primeiros 300 passos de integração, respectivamente. Tanto no método de Euler explícito como no método de Euler implícito, a integração numérica produz uma Hamiltoniana estável, grosso modo, nos primeiros 400 passos. Nesta fase da integração, ambos os métodos apresentam uma variação brusca na evolução da Hamiltoniana. Note-se que, embora após essa breve fase de convulsão, a Hamiltoniana estabilize, o valor numérico da

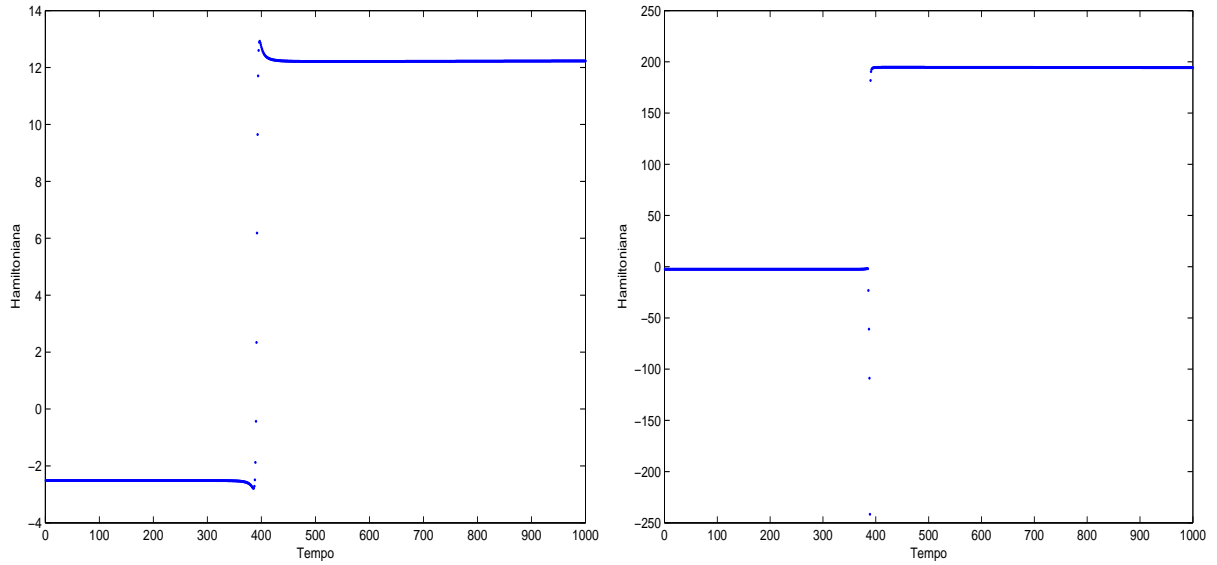


Figura 6.2: Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, para os primeiros 1000 passos de integração, no método de Euler explícito e no método de Euler implícito, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com passo de integração $h = 10^{-3}$.

Hamiltoniana é significativamente errado. Como nos sistemas hamiltonianos a função Hamiltoniana é um integral do movimento, também no sentido da evolução deste invariante, os métodos de Euler explícito e implícito não reproduzem o retrato da fase. Só durante os cerca de primeiros

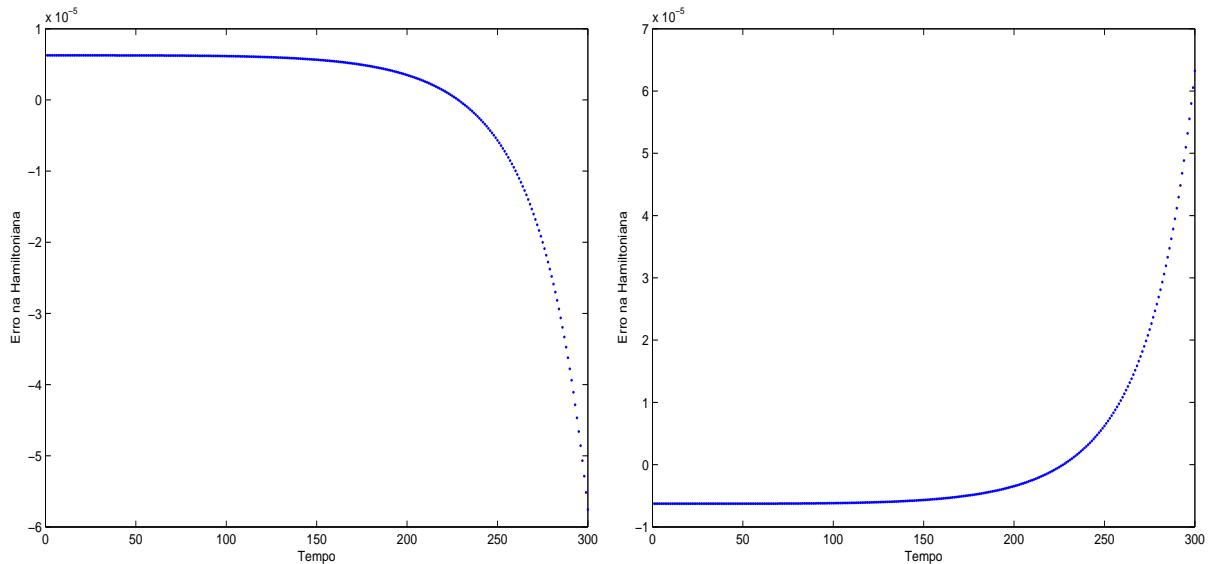


Figura 6.3: Evolução do erro na Hamiltoniana, no problema de Hill, nos primeiros 300 passos de integração, no método de Euler explícito e no método de Euler implícito, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com passo de integração $h = 10^{-3}$.

300 passos da integração numérica é que ambos os métodos produzem uma trajetória do ter-

ceiro corpo confinada ao interior da curva de Hill oval e, também, produzem uma Hamiltoniana estável. Observando a figura 6.3, nota-se que, durante esta fase da integração, o erro na função Hamiltoniana é na ordem dos 10^{-5} mas, a partir daí, o erro cresce em valor absoluto, nos dois métodos.

Os resultados numéricos obtidos mostram, então, que o método de Euler explícito e o método de Euler implícito não reproduzem o retrato da fase no longo prazo, só encerrando em si alguma utilidade na integração a muito curto prazo.

Um outro método clássico frequentemente usado é o método de Runge-Kutta de ordem 4. Este método não é simpléctico, característica qualitativa a ser preservada na integração de sistemas hamiltonianos e, por este motivo, não será o integrador mais adequado na integração do problema de Hill. No entanto, por ser um método de ordem 4, será de esperar a produção de resultados numéricos superiores aos produzidos pelo método de Euler explícito e pelo método de Euler implícito.

A figura 6.4 retrata as trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, no método Runge-Kutta de ordem 4, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. Um contraste evidente com os

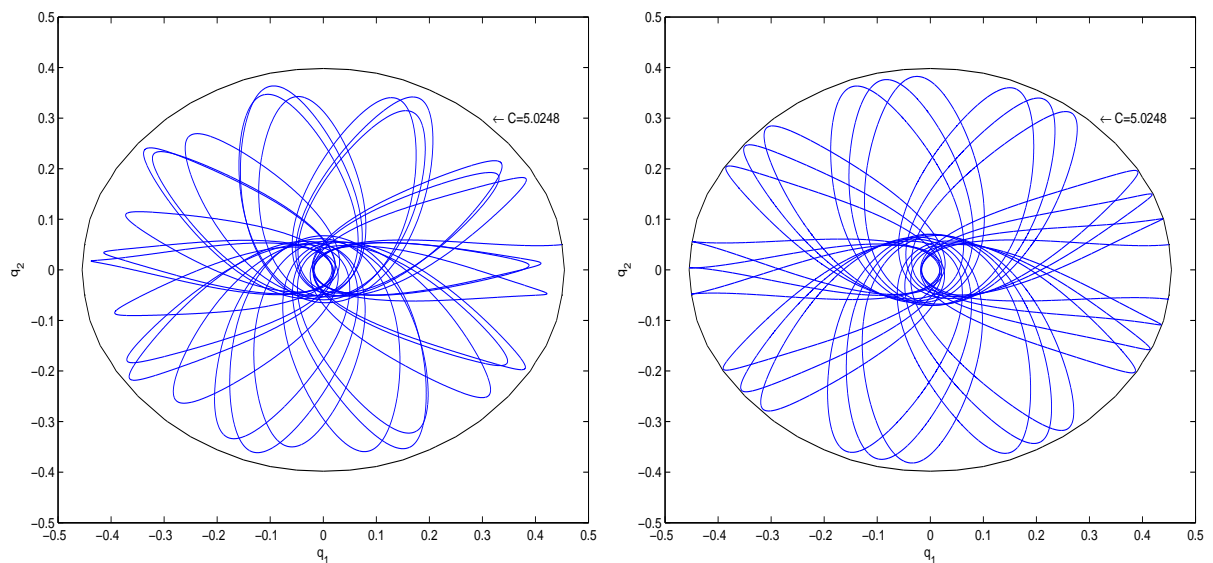


Figura 6.4: Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, no método Runge-Kutta de ordem 4, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$. A integração foi feita para 20000 e 200000 passos, respectivamente.

resultados numéricos obtidos com os métodos de Euler explícito e implícito, é o facto que as trajectórias estão dentro da região do movimento permitida, dentro da curva de Hill. No entanto, com passo de integração $h = 10^{-3}$, o método é ligeiramente dissipativo, ou seja, esta dissipação artificial reflectida nos resultados deturpa a qualidade da integração. Com passo de integração mais pequeno, $h = 10^{-4}$, a dissipação numérica é atenuada. Para confirmar estas sugestões, observe-se a figura 6.5. Quando a integração numérica é efectuada com passo de integração

$h = 10^{-3}$, a função Hamiltoniana obtida exibe uma tendência de decrescimento. Diminuindo o

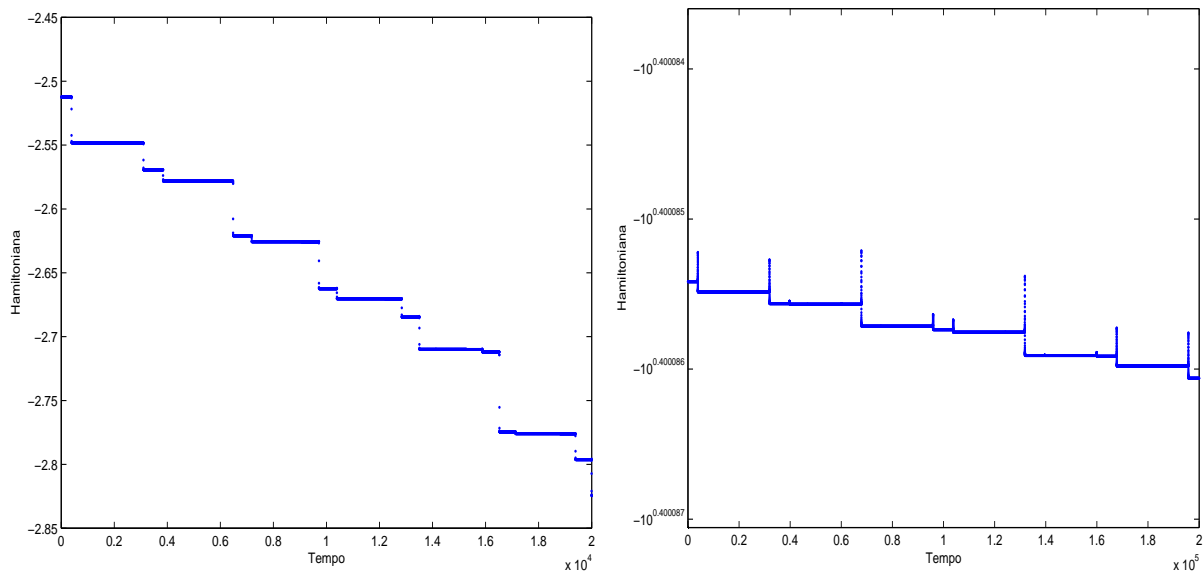


Figura 6.5: Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método RK4, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$. No segundo caso, para o eixo das ordenadas foi adoptada uma escala logarítmica.

passo de integração, a dissipação numérica na Hamiltoniana atenua-se e é mais suave; no entanto, os resultados não são os que a literatura aponta na integração de sistemas hamiltonianos por integradores geométricos, nomeadamente, que a Hamiltoniana oscila em torno de um valor. A desvantagem da tendência de decrescimento da Hamiltoniana numérica face a um comportamento oscilatório é que esta Hamiltoniana, à medida que a integração avança, vai-se afastando do valor da Hamiltoniana do sistema de equações diferenciais.

No entanto, e dependendo dos objectivos associados a cada problema a resolver, pode dizer-se que os resultados numéricos produzidos pelo método Runge-Kutta de ordem 4 poderão ser satisfatórios com um passo de integração pequeno. Neste caso particular da integração numérica do problema de Hill, embora com um passo de integração de 10^{-3} a dissipação numérica seja visível a olho nu, confirmado com uma evolução no erro na Hamiltoniana na ordem dos 0.005, quando se diminui o passo para 10^{-4} , a magnitude na evolução do erro na Hamiltoniana é substancialmente menor, na ordem dos 10^{-7} , conforme se pode observar na figura 6.6.

6.1.2 Resultados numéricos com o método de Euler simplético

Em comparação, o método de Euler simplético é mais vantajoso do que o método clássico RK4. Ambos os métodos são explícitos, mas o método de Euler simplético, apesar de ser de ordem 1, exibe resultados numéricos com qualidade superior, em virtude de ser, como o nome o indica, um método que preserva a symplecticidade do sistema de equações diferenciais hamiltoniano.

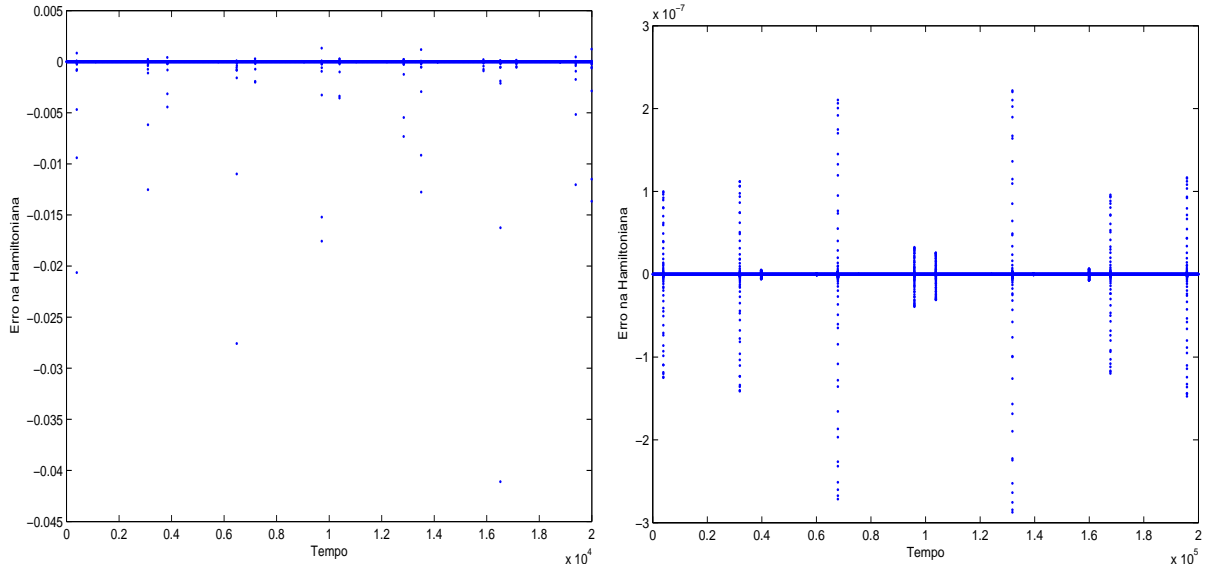


Figura 6.6: Evolução do erro na Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método RK4, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

Como a symplecticidade do fluxo hamiltoniano é a característica mais marcante dos sistemas hamiltonianos, diz-se que a preservação dessa característica é inegociável.

Para verificar e confirmar no caso da integração numérica do problema de Hill, a veracidade destas afirmações, observem-se as figuras 6.7, 6.8 e 6.9. A primeira delas mostra que, por um lado, o método de Euler simplético produz trajetórias contidas na região permitida ao movimento e, por outro lado, o efeito dissipativo numérico desapareceu. Observando a figura 6.8, é evidente que a amplitude de variação da função Hamiltoniana é menor quando o passo de integração é menor: com passo de integração 10^{-3} , a amplitude de variação da Hamiltoniana é, grosso modo, de 10, ao passo que com 10^{-4} , essa banda diminui para 1. É de enfatizar, também, a evolução da Hamiltoniana ao longo do processo de integração: é um comportamento oscilatório e não mostra uma tendência de crescimento ou de decrescimento. Tal constitui uma vantagem, já que desta forma, o valor numérico da Hamiltoniana, em qualquer instante de integração, mesmo no muito longo prazo, será sempre um valor próximo do valor da Hamiltoniana do sistema de equações diferenciais.

A observação da figura 6.9 permite concluir que o erro na função Hamiltoniana para a integração numérica com passo de integração 10^{-3} é na ordem das unidades, ao passo que com passo de integração de 10^{-4} , o erro na Hamiltoniana é na ordem da segunda casa decimal.

Em síntese, sobre os resultados numéricos obtidos com o método de Euler simplético, pode afirmar-se que o integrador, embora de ordem 1, como é um integrador simplético, reproduziu o comportamento do fluxo hamiltoniano subjacente ao sistema de equações diferenciais; adicionalmente, é observável que as trajetórias numéricas estão dentro da região permitida do movimento, com ambos os passos de integração. Por outro lado, a função Hamiltoniana numérica

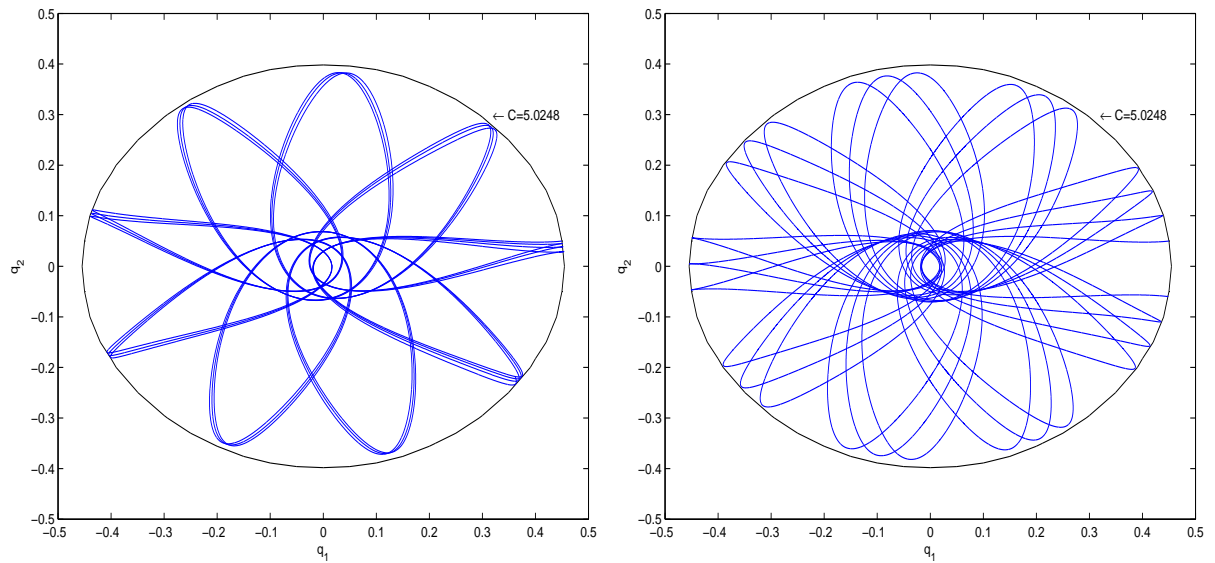


Figura 6.7: Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, no método de Euler simpléctico, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$. A integração foi feita para 20000 e 200000 passos, respectivamente.

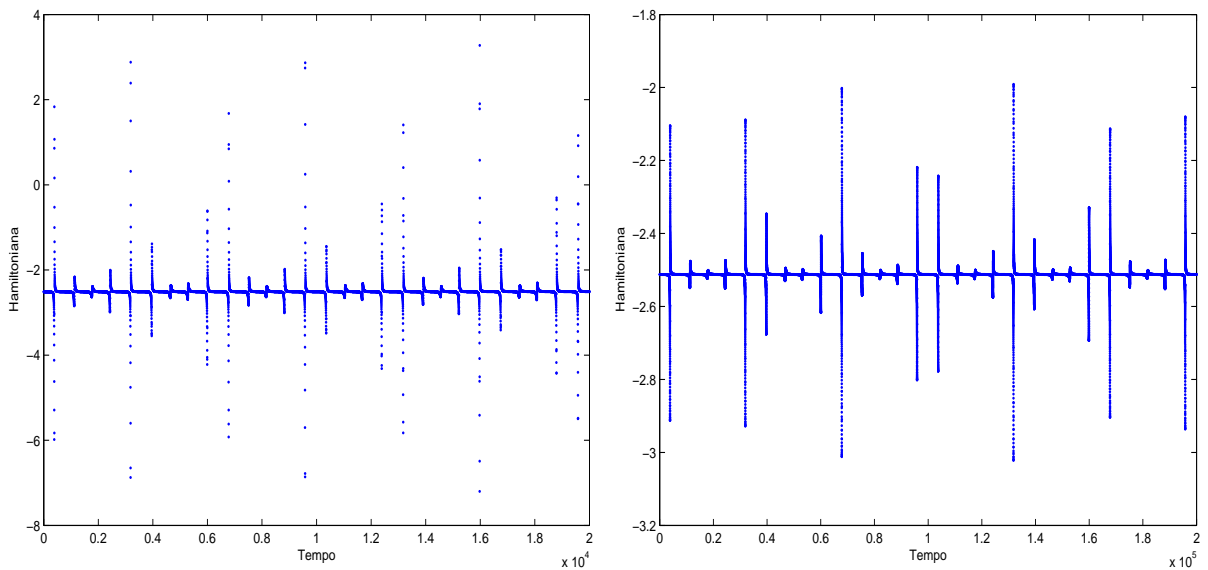


Figura 6.8: Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

demonstra um comportamento oscilatório ao longo de todo o processo de integração, como seria de esperar nos integradores simplécticos. Por fim, a diminuição do passo de integração permitiu reduzir o erro na função Hamiltoniana; os resultados obtidos sustentam a ideia de que o passo de integração 10^{-4} é suficiente, já que o erro na Hamiltoniana é reduzido.

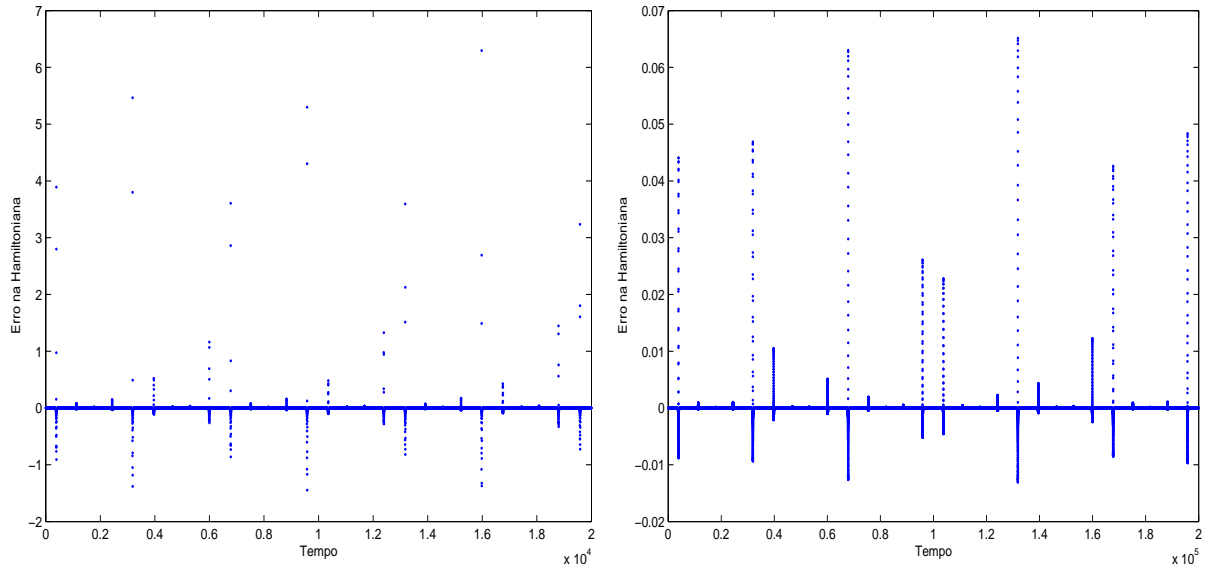


Figura 6.9: Evolução do erro na Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

6.2 Comparação entre métodos simplécticos com passo de integração fixo

A integração numérica do problema de Hill será feita para o mesmo valor da constante de Jacobi, $C = 5.02476$, com condições iniciais idênticas à secção anterior, de forma a ser legítimo proceder a comparações.

Os integradores geométricos comparados nesta secção são, além do método de Euler simpléctico, o método Störmer-Verlet geral e a regra do ponto média implícita. O primeiro deles é de ordem 1 e os dois últimos são de ordem 2; procurar-se-á averiguar se o aumento na ordem do método resulta num incremento da qualidade dos resultados numéricos significativo. A diferença marcante, à partida, do método Störmer-Verlet geral e a regra do ponto médio implícita reside no facto de que o primeiro é um método explícito, ao passo que o segundo tem natureza implícita. Como ambos são integradores simplécticos de ordem 2, pretende-se saber se um deles, no caso da integração numérica do problema de Hill, produz resultados que reproduzam melhor o retrato da fase.

De seguida, apresentam-se estes dois métodos aplicados ao problema de Hill.

O método Störmer-Verlet geral

O método Störmer-Verlet 3.43 não pode ser utilizado no problema de Hill, já que pressupõe uma Hamiltoniana separável, e a Hamiltoniana do problema de Hill não o é. Por este motivo,

integrador a utilizar deve ser o método Störmer-Verlet geral 3.53.

Considere-se

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -H_q \\ &= -J^T p - Aq - \frac{q}{\|q\|^3} \\ &= f(q, p),\end{aligned}\tag{6.10}$$

e

$$\begin{aligned}\dot{q} &= H_p \\ &= p + Jp \\ &= g(q, p).\end{aligned}\tag{6.11}$$

O método Störmer-Verlet geral é:

$$\begin{aligned}p_{n+\frac{1}{2}} &= p_n + \frac{h}{2} f\left(q_n, p_{n+\frac{1}{2}}\right) \\ q_{n+1} &= q_n + \frac{h}{2} \left[g\left(q_n, p_{n+\frac{1}{2}}\right) + g\left(q_{n+1}, p_{n+\frac{1}{2}}\right) \right] \\ p_{n+1} &= p_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} f\left(q_{n+1}, p_{n+\frac{1}{2}}\right).\end{aligned}\tag{6.12}$$

As duas primeiras equações parecem ser implícitas em termos de $p_{n+\frac{1}{2}}$ e q_{n+1} , respectivamente. No entanto, elas podem ser reescritas, no problema de Hill, de uma forma explícita, conforme se mostra.

$$\begin{aligned}p_{n+\frac{1}{2}} &= p_n + \frac{h}{2} f\left(q_n, p_{n+\frac{1}{2}}\right) \\ &= p_n + \frac{h}{2} \left(-J^T p_{n+\frac{1}{2}} - Aq_n - \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right).\end{aligned}\tag{6.13}$$

Então,

$$\begin{aligned}p_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} J^T p_{n+\frac{1}{2}} &= p_n + \frac{h}{2} \left(-Aq_n - \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) \\ \Rightarrow \left(I + \frac{h}{2} J^T \right) p_{n+\frac{1}{2}} &= p_n + \frac{h}{2} \left(-Aq_n - \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) \\ \Rightarrow p_{n+\frac{1}{2}} &= \left(I + \frac{h}{2} J^T \right)^{-1} \left[p_n - \frac{h}{2} \left(Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) \right].\end{aligned}\tag{6.14}$$

Para a segunda equação obtém-se

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= q_n + \frac{h}{2} \left[g \left(q_n, p_{n+\frac{1}{2}} \right) + g \left(q_{n+1}, p_{n+\frac{1}{2}} \right) \right] \\ &= q_n + \frac{h}{2} \left(p_{n+\frac{1}{2}} + Jq_n + p_{n+\frac{1}{2}} + Jq_{n+1} \right). \end{aligned} \quad (6.15)$$

Resulta,

$$\begin{aligned} q_{n+1} - \frac{h}{2} Jq_{n+1} &= q_n + \frac{h}{2} \left(2p_{n+\frac{1}{2}} + Jq_n \right) \\ \Rightarrow \left(I - \frac{h}{2} J \right) q_{n+1} &= \left(I + \frac{h}{2} J \right) q_n + hp_{n+\frac{1}{2}} \\ \Rightarrow q_{n+1} &= \left(I - \frac{h}{2} J \right)^{-1} \left[\left(I + \frac{h}{2} J \right) q_n + hp_{n+\frac{1}{2}} \right]. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Em síntese, o método Störmer-Verlet geral para o problema de Hill é

$$\begin{aligned} p_{n+\frac{1}{2}} &= \left(I + \frac{h}{2} J^T \right)^{-1} \left[p_n - \frac{h}{2} \left(Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) \right] \\ q_{n+1} &= \left(I - \frac{h}{2} J \right)^{-1} \left[\left(I + \frac{h}{2} J \right) q_n + hp_{n+\frac{1}{2}} \right] \\ p_{n+1} &= \left(I - \frac{h}{2} J^T \right) p_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2} \left(Aq_{n+1} + \frac{q_{n+1}}{\|q_{n+1}\|^3} \right), \end{aligned} \quad (6.17)$$

onde

$$\begin{aligned} \left(I + \frac{h}{2} J^T \right)^{-1} &= \left(I - \frac{h}{2} J \right)^{-1} \\ &= \frac{2}{4+h^2} \begin{pmatrix} 2 & h \\ -h & 2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Regra do ponto médio implícita

A regra do ponto média implícita para o problema de Hill é expressa da seguinte forma:

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= q_n + hH_p \left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2}, \frac{p_n + p_{n+1}}{2} \right) \\ &= q_n + h \left(\frac{p_n + p_{n+1}}{2} + J \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \\ p_{n+1} &= p_n - hH_q \left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2}, \frac{p_n + p_{n+1}}{2} \right) \\ &= p_n - h \left(J^T \frac{p_n + p_{n+1}}{2} + A \frac{q_n + q_{n+1}}{2} + \frac{4(q_n + q_{n+1})}{\|q_n + q_{n+1}\|^3} \right). \end{aligned} \quad (6.18)$$

Agora, sejam $\mathbf{y} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})^T$ e $f = (H_{\mathbf{p}}, -H_{\mathbf{q}})^T$. Para calcular \mathbf{y}_{n+1} , é necessário resolver-se o sistema de equações não lineares dado por

$$G(\mathbf{y}_{n+1}) = \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n - hf(\mathbf{y}_{n+1}) = 0, \quad (6.19)$$

podendo ser usado o método de Newton descrito no apêndice B.

6.2.1 Resultados numéricos com o método Störmer-Verlet geral

A integração numérica do problema de Hill com o método Störmer-Verlet geral foi feita com passo de integração 10^{-3} e 10^{-4} , num total de 20000 e 200000 passos, respectivamente.

A figura 6.10 retrata as trajectórias do terceiro corpo para ambos os casos. A mera inspecção vi-

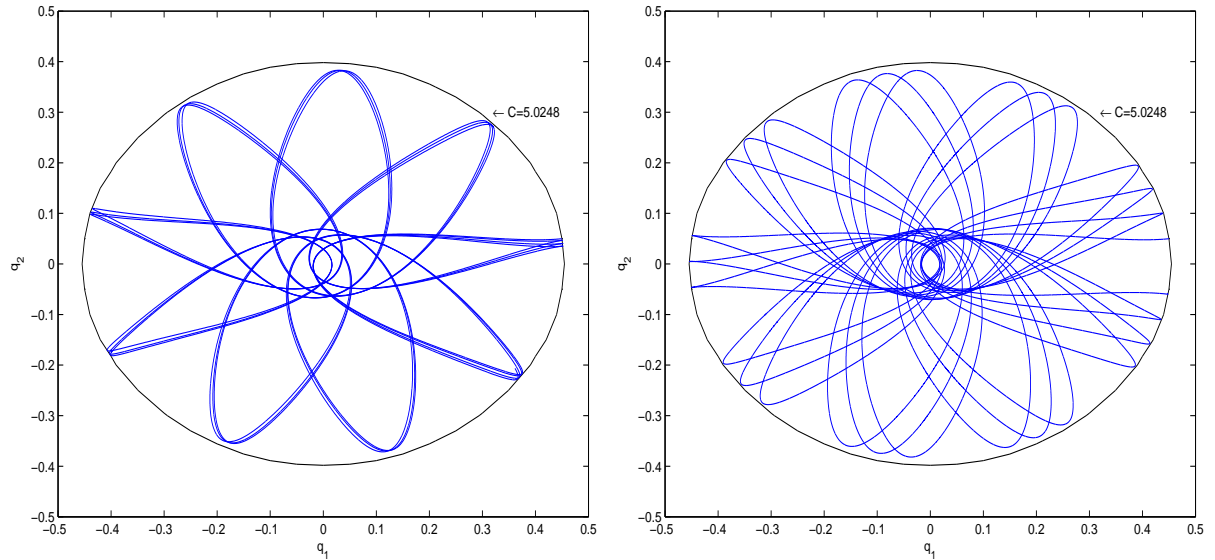


Figura 6.10: Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

sual permite afirmar que as trajectórias numéricas são muito similares aos resultados numéricos obtidos com o método de Euler simplético. Para chegar mais longe na comparação, atente-se nas figuras 6.11 e 6.12.

Para ambos os passos de integração, a função Hamiltoniana é estável, no sentido que volta repetidamente ao valor da Hamiltoniana no instante $t = 0$ e, conseqüentemente, nesta vertente reproduz o retrato da fase do sistema de equações diferenciais. Como seria de esperar, com o passo de integração menor, a amplitude de variação da Hamiltoniana é menor, grosso modo, na ordem dos 0.02; com o passo de integração 10^{-3} , a banda de variação da função é mais larga, na ordem dos 1.6. O erro na Hamiltoniana é na ordem das unidades com passo 10^{-3} , e na ordem dos 10^{-3} para o passo 10^{-4} .

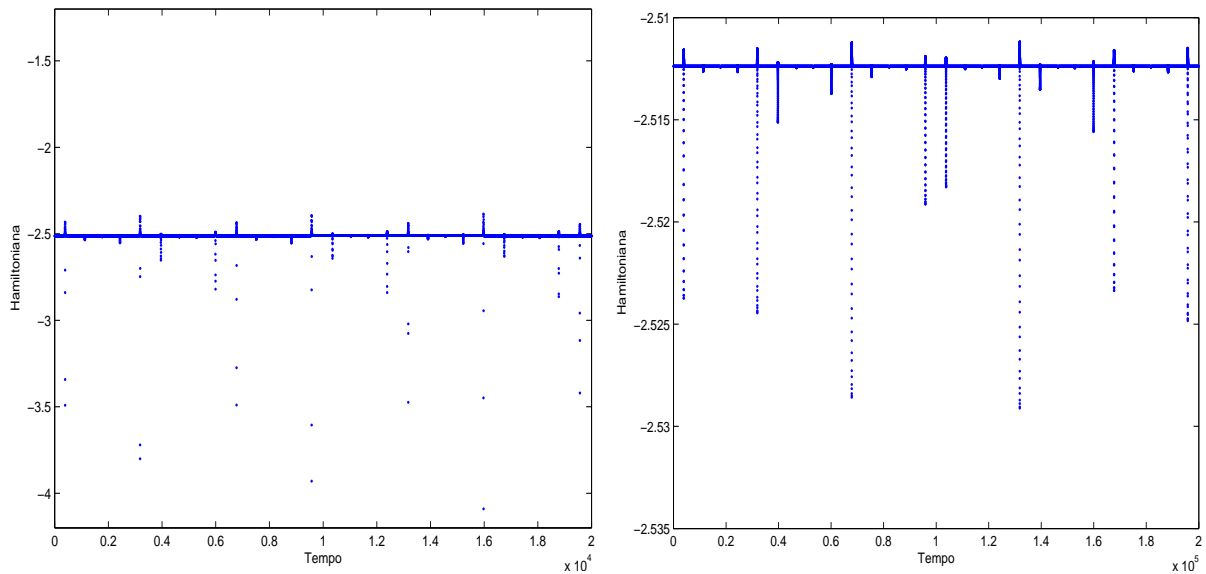


Figura 6.11: Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

Comparando os resultados numéricos obtidos pelo método de Euler simplético e o método

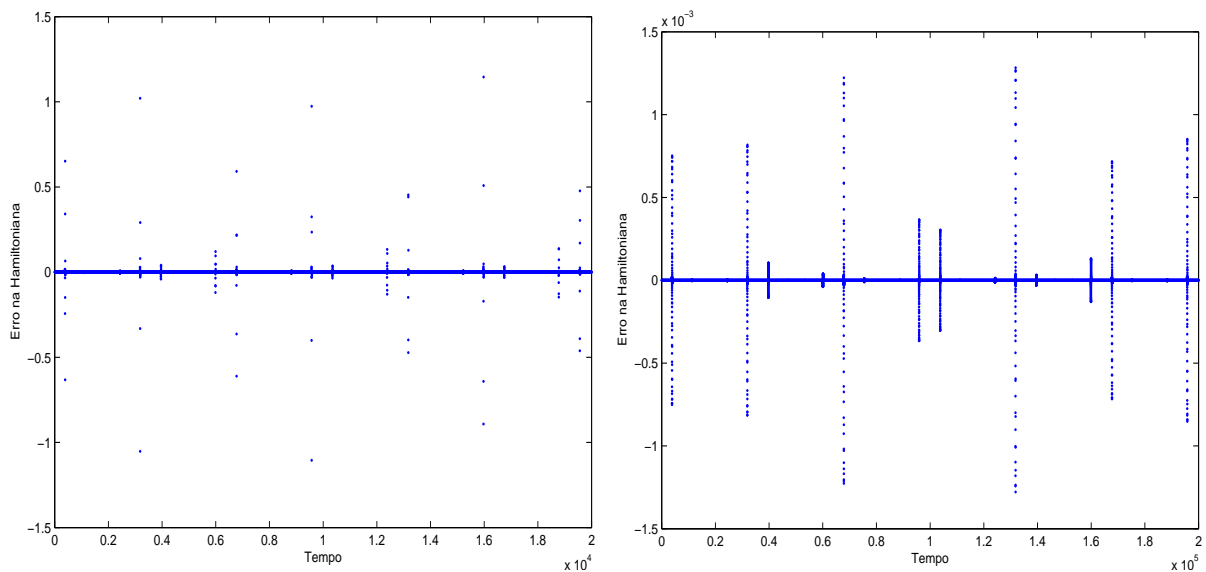


Figura 6.12: Evolução do erro na Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

Störmer-Verlet geral, é evidente que o segundo produz resultados melhores, no sentido da evolução da função Hamiltoniana. Com passo 10^{-3} , o método de Euler simplético exibe uma variação na Hamiltoniana, grosso modo, de 10 unidades, e o método Störmer-Verlet geral, de 1.6 unidades; este segundo método tem uma amplitude de variação da Hamiltoniana na or-

dem dos 16% da amplitude de variação do primeiro método. Quando se integra o problema com um passo 10^{-4} , o decréscimo na variação da amplitude da Hamiltoniana é mais acentuado no método Störmer-Verlet geral, passando a ser 0.02 unidades contra 1 unidade no método de Euler simpléctico (agora, a amplitude da variação da Hamiltoniana produzida pelo método Störmer-Verlet geral é 2% da amplitude variação produzida pelo método de Euler simpléctico). No entanto, em termos práticos, e para problemas que não exijam uma precisão muito apurada, com passo de integração 10^{-4} , pode dizer-se que, em ambos os métodos, os resultados numéricos produzidos ao nível das trajectórias do terceiro corpo e da evolução da função Hamiltoniana são similares.

6.2.2 Resultados numéricos com a regra do ponto médio implícita

A integração numérica do problema de Hill com a regra do ponto médio implícita foi, analogamente ao método Störmer-Verlet geral, feita com passo de integração 10^{-3} e 10^{-4} , num total de 20000 e 200000 passos, respectivamente. Os resultados numéricos obtidos são os que se seguem. Relativamente às trajectórias do terceiro corpo, observe-se a figura 6.13. Os resultados obti-

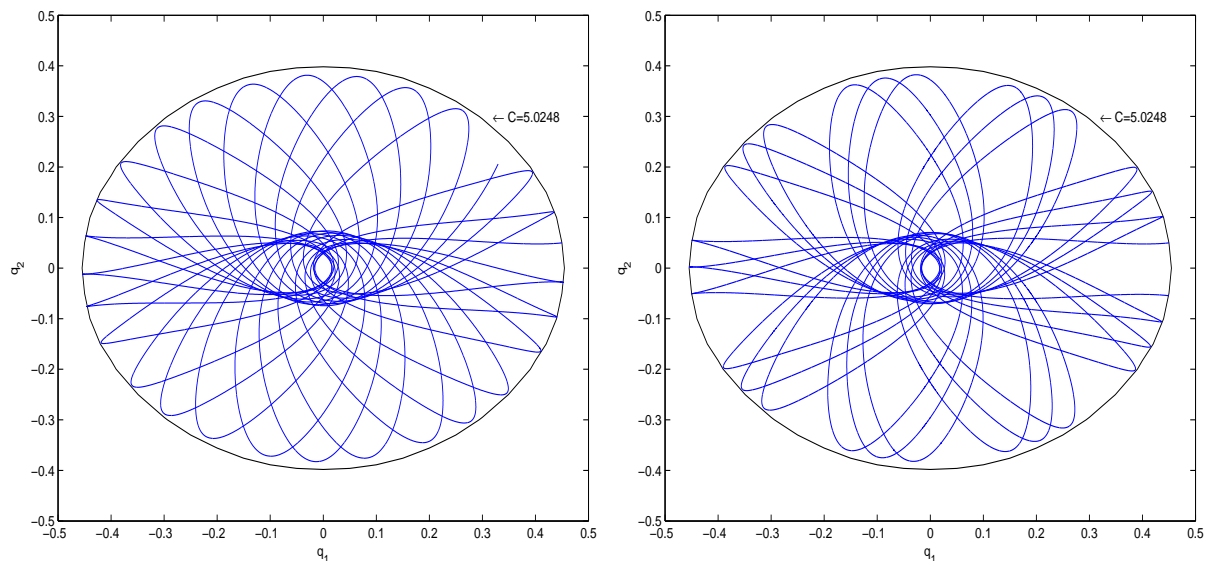


Figura 6.13: Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, com a regra do ponto média implícita, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

dos são similares aos produzidos pelos outros dois métodos simplécticos. Para prosseguir a comparação, tome-se atenção à figura 6.14. A informação mais visível retirada pela inspecção visual é, para ambos os passos de integração, a estabilidade da Hamiltoniana, de forma que, em qualquer instante de integração, o seu valor numérico não difere substancialmente do seu valor no instante inicial. A amplitude da variação da Hamiltoniana é 1.6 unidades para o passo de integração maior e 0.018 unidades para o passo de integração menor. Estes resultados são

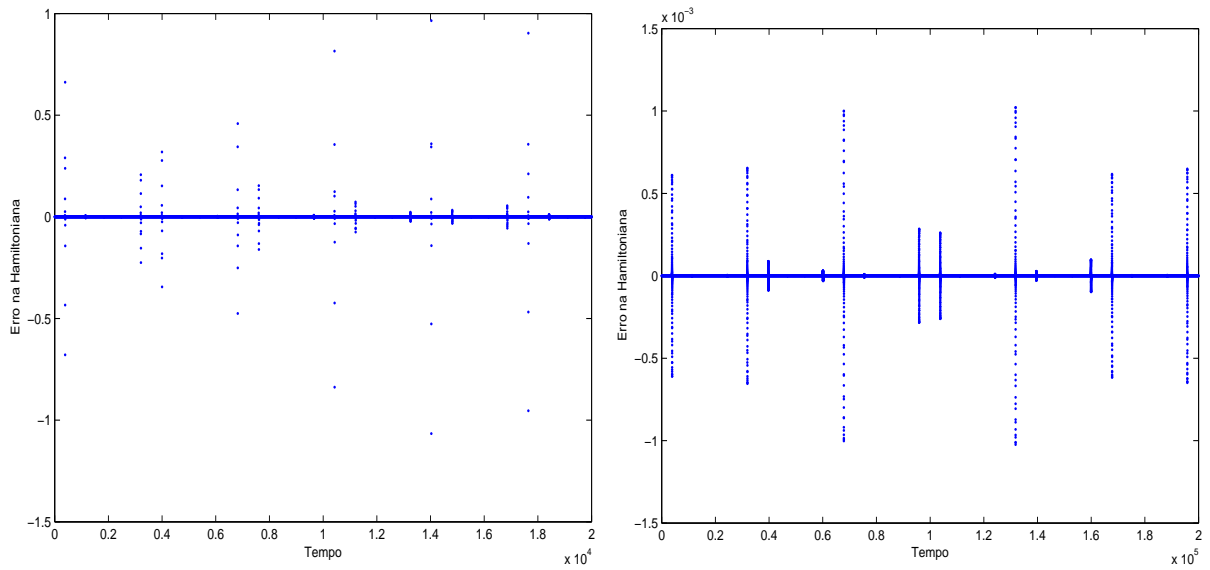


Figura 6.14: Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com a regra do ponto média implícita, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

praticamente idênticos aos obtidos pelo método Störmer-Verlet. O erro na função Hamiltoniana,

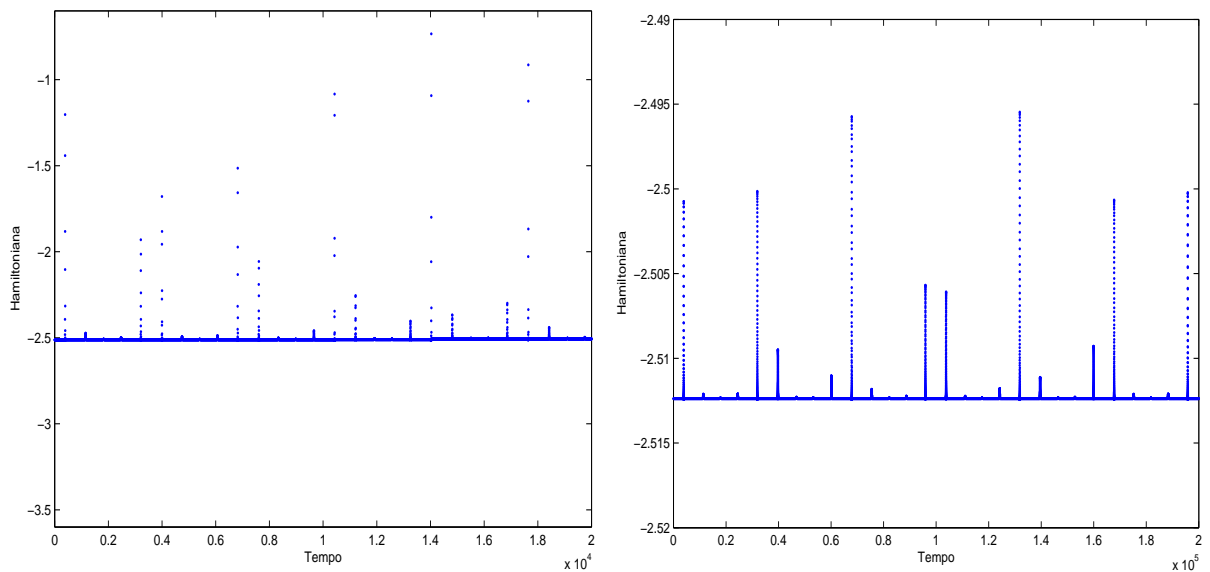


Figura 6.15: Evolução do erro na Hamiltoniana, no problema de Hill, com a regra do ponto média implícita, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

conforme observável na figura 6.15, é da mesma ordem de grandeza do método Störmer-Verlet. Fazendo uma síntese das comparações entre os métodos simplécticos seleccionados, pode dizer-se que:

1. para um passo de integração de 10^{-4} , os resultados numéricos obtidos são, em termos

práticos, similares;

2. se for exigida uma maior precisão nos resultados, deve privilegiar-se o uso dos métodos de ordem superior, ou seja, o método Störmer-Verlet. e a regra do ponto médio implícita demonstraram resultados mais precisos do que o método de Euler simpléctico, no que concerne à evolução da função Hamiltoniana;
3. para um passo de integração de 10^{-3} , já é visível a diferença entre os resultados obtidos entre o método de ordem 1 e os métodos de ordem 2 seleccionados;
4. embora o método Störmer-Verlet produza resultados similares à regra do ponto média implícita, tanto para o passo de integração 10^{-3} como 10^{-4} , o primeira tem a grande vantagem de ter natureza explícita, ao passo que o segundo, como o seu nome sugere, é implícito, exigindo, por isso, maiores recursos computacionais e de tempo.

6.3 Comparação entre métodos simplécticos: com passo de integração fixo e adaptativo

Nesta secção, o método de Euler simpléctico e o método Störmer-Verlet geral são comparados na sua versão adaptativa, numa tentativa de verificar se os resultados já obtidos poderão ser melhorados caso o passo de integração seja variável.

Considere-se o sistema hamiltoniano

$$\dot{y} = f(y). \tag{6.20}$$

Um integrador com passo de integração variável produz aproximações y_n numa malha $\{t_n\}$ não equidistante. Pode obter-se o mesmo efeito aplicando uma transformação temporal ao sistema 6.20 e, então, implementando um integrador com passo de integração fixo.

Neste sentido, considere-se a transformação temporal $t \leftrightarrow \tau$. Se a transformação temporal é dada como a solução de uma equação diferencial, então, pela regra da cadeia,

$$\frac{dy}{d\tau} = \frac{dy}{dt} \frac{dt}{d\tau},$$

obtendo-se o sistema transformado

$$\frac{dy}{d\tau} = f(y) \frac{dt}{d\tau}.$$

Fazendo $\frac{dt}{d\tau} = s(y)$, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{dy}{d\tau} &= s(y)f(y) \\ \frac{dt}{d\tau} &= s(y). \end{aligned} \tag{6.21}$$

Aplicando um método numérico com passo de integração constante ε a 6.21, obtém-se a aproximação

$$y_n \approx y(\tau_n) = y(t_n), \quad \text{onde} \quad \tau_n = n\varepsilon$$

e

$$t_{n+1} - t_n = \int_{n\varepsilon}^{(n+1)\varepsilon} s(y(\tau)) d\tau \approx \varepsilon s(y_n). \quad (6.22)$$

Naturalmente que se pretende que o sistema 6.21 ainda tenha natureza hamiltoniana. No entanto, tal só acontecerá se $s(y)$ for constante, resultado que não é desejável para uma integração com passo variável [43, 44].

6.3.1 O método de Euler simpléctico adaptativo para Hamiltonianas não separáveis

Nesta secção vai-se aplicar uma ideia proposta por Hairer [10] ao caso da Hamiltoniana não separável do problema de Hill, dada pelo sistema

$$\dot{p} = -H_q \quad \text{e} \quad \dot{q} = H_p. \quad (6.23)$$

Admita-se que se quer integrar o sistema 6.23 com passos de integração de tamanho

$$h = \varepsilon s(p, q, \varepsilon),$$

onde $s(p, q, \varepsilon) > 0$ é uma função dada que satisfaz $\frac{dt}{d\tau} = s(p, q, \varepsilon)$, sendo $t \leftrightarrow \tau$ a transformação temporal, e ε um parâmetro pequeno.

Considere-se, para um valor inicial fixo $H_0 = H(p_0, q_0)$, a nova função Hamiltoniana

$$K(p, q, \varepsilon) = s(p, q, \varepsilon)(H(p, q) - H_0), \quad (6.24)$$

e o novo sistema hamiltoniano

$$\begin{aligned} \frac{dp}{d\tau} &= -K_q(p, q, \varepsilon) \\ &= -s(p, q, \varepsilon)H_q(p, q) - s_q(p, q, \varepsilon)(H(p, q) - H_0), \\ \frac{dq}{d\tau} &= K_p(p, q, \varepsilon) \\ &= s(p, q, \varepsilon)H_p(p, q) + s_p(p, q, \varepsilon)(H(p, q) - H_0). \end{aligned} \quad (6.25)$$

Agora, mostra-se que a vantagem de implementar integradores explícitos pode ser preservada para a função Hamiltoniana transformada 6.24, no caso da Hamiltoniana não separável do

problema de Hill

$$H = \frac{1}{2}\|\mathbf{p}\|^2 - \mathbf{q}^T \mathbf{J} \mathbf{p} - \frac{1}{\|\mathbf{q}\|} + \frac{1}{2} \mathbf{q}^T \mathbf{A} \mathbf{q},$$

onde a matriz \mathbf{J} é dada por 2.9 e a matriz \mathbf{A} é dada por 6.1.

Aplica-se o método de Euler simpléctico com uma função $s(q, \varepsilon)$, independente de p ,

$$s(q, \varepsilon) = (q^T q)^r \quad (6.26)$$

para $0 \leq r \leq 1$, de forma a produzirem-se passos de integração cada vez menores à medida que a posição actual do terceiro corpo se aproxima da origem. Note-se que, pela expressão da Hamiltoniana do problema de Hill, quando o terceiro corpo se aproxima da origem, a Hamiltoniana tende para infinito. Assim, justifica-se uma escolha do passo de integração dependente da distância do terceiro corpo à origem, de forma a que o método seja mais «sensível» na integração na vizinhança da origem. Então, a nova Hamiltoniana é da forma

$$K = s(q, \varepsilon)(H(p, q) - H_0), \quad (6.27)$$

e o novo sistema é dado por

$$\begin{aligned} \frac{dp}{d\tau} &= -K_q(p, q, \varepsilon) \\ &= -s(q, \varepsilon)H_q(p, q) - s_q(q, \varepsilon)(H(p, q) - H_0), \\ \frac{dq}{d\tau} &= K_p(p, q, \varepsilon) \\ &= s(q, \varepsilon)H_p(p, q), \end{aligned} \quad (6.28)$$

onde

$$s_q = 2r(q^T q)^{r-1}q. \quad (6.29)$$

O método de Euler simpléctico, aplicado com passo de integração constante $\varepsilon > 0$, é dado por

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n - \varepsilon s(q_n)H_q(p_{n+1}, q_n) - \varepsilon s_q(q_n)(H(p_{n+1}, q_n) - H_0) \\ q_{n+1} &= q_n + \varepsilon s(q_n)H_p(p_{n+1}, q_n), \end{aligned} \quad (6.30)$$

e produz a aproximação em $t_{n+1} = t_n + \varepsilon s(q_n)$, devido a 6.22.

Este sistema pode ser expandido e escrito como

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n - \varepsilon s(q_n) \left(J^T p_{n+1} + A q_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) \\ &\quad - \varepsilon s_q(q_n) \left(\frac{1}{2} p_{n+1}^T p_{n+1} - q_n^T J p_{n+1} + \frac{1}{2} q_n^T A q_n - \frac{1}{\|q_n\|} - H_0 \right) \\ q_{n+1} &= q_n + \varepsilon s(q_n)(p_{n+1} + J q_n). \end{aligned} \quad (6.31)$$

A primeira equação do sistema 6.31 parece implícita em p_{n+1} mas, no entanto, pode ser manipulada conforme se segue.

$$\begin{aligned}
 p_{n+1} &= p_n - \varepsilon s(q_n) J^T p_{n+1} - \varepsilon s(q_n) \left(Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) \\
 &\quad + \varepsilon s_q(q_n) q_n^T J p_{n+1} - \varepsilon s_q(q_n) \left(\frac{1}{2} p_{n+1}^T p_{n+1} + \frac{1}{2} q_n^T Aq_n - \frac{1}{\|q_n\|} - H_0 \right) \\
 \Rightarrow \quad p_{n+1} + \varepsilon s(q_n) J^T p_{n+1} - \varepsilon s_q(q_n) q_n^T J p_{n+1} &= p_n - \varepsilon s(q_n) \left(Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) \\
 &\quad - \varepsilon s_q \left(\frac{1}{2} p_{n+1}^T p_{n+1} + \frac{1}{2} q_n^T Aq_n - \frac{1}{\|q_n\|} - H_0 \right) \\
 \Rightarrow \quad p_{n+1} &= (I + \varepsilon s(q_n) J^T - \varepsilon s_q(q_n) q_n^T J)^{-1} \left[p_n - \varepsilon s(q_n) \left(Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \varepsilon s_q(q_n) \left(\frac{1}{2} p_{n+1}^T p_{n+1} + \frac{1}{2} q_n^T Aq_n - \frac{1}{\|q_n\|} - H_0 \right) \right].
 \end{aligned}$$

Esta equação é quadrática em p_{n+1} , podendo ser resolvida pela introdução da quantidade escalar

$$\beta = \|p_{n+1}\|_2^2 = p_{n+1}^T p_{n+1}.$$

A equação pode, agora, ser reduzida à equação quadrática escalar:

$$\beta = \left\| (I + \varepsilon s(q_n) J^T - \varepsilon s_q(q_n) q_n^T J)^{-1} \left[p_n - \varepsilon s(q_n) \left(Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) \right. \right. \\
 \left. \left. - \varepsilon s_q(q_n) \left(\frac{1}{2} \beta + \frac{1}{2} q_n^T Aq_n - \frac{1}{\|q_n\|} - H_0 \right) \right] \right\|_2,$$

a qual pode ser escrita na forma

$$a\beta^2 + b\beta + c = 0,$$

equação esta que pode ser resolvida directamente. As expressões para os coeficiente a, b, c constam dos programas em Matlab, que seguem no apêndice A.

6.3.2 Resultados numéricos com o método de Euler simpléctico adaptativo

A integração numérica do problema de Hill com o método de Euler simpléctico adaptativo é levada a cabo para a mesma constante de Jacobi $C = 5.02476$ e com as mesmas condições iniciais das integrações numéricas anteriores, $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

Nas integrações numéricas que se seguem, considera-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e a integração será feita para $t \in [0; 20]$. Para cada integração será exibida a trajectória do terceiro corpo, a evolução da função Hamiltoniana produzida pelo método, a evolução do passo de integração e, em particular, será indicado o passo de integração mínimo e o passo de integração máximo, assim como o número de passos; será também apresentado um gráfico que ilustre a evolução da nova função Hamiltoniana $K(p, q, \varepsilon)$.

Numa fase seguinte, procede-se de forma análoga, mas para uma escolha de $\varepsilon = 10^{-3}$. Finalmente, é feita a comparação global com o resultados numéricos obtidos na secção anterior, nomeadamente, com o método de Euler simpléctico e com o Störmer-Verlet geral.

Assuma-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{1}{2}$.

A figura 6.16 representa a trajectória do terceiro corpo. A mera observação desta figura só

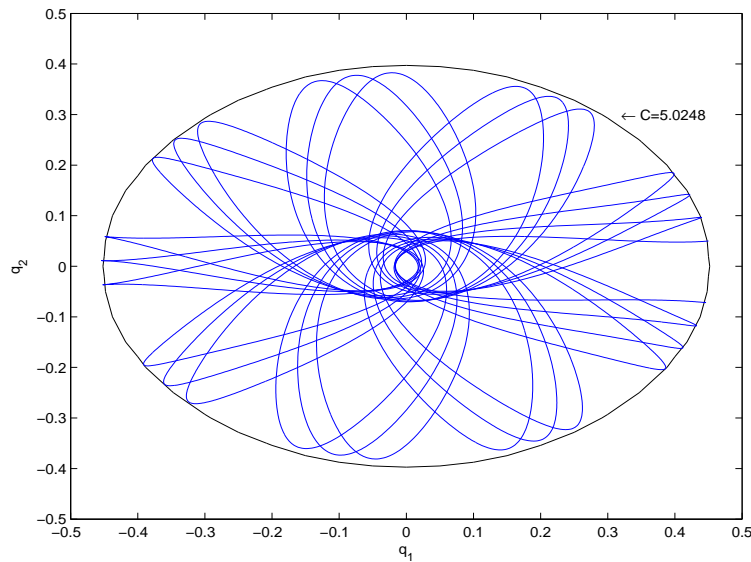


Figura 6.16: Trajectória do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

permite afirmar que os resultados obtidos são semelhantes aos produzidos pelo método Störmer-Verlet geral.

A função Hamiltoniana, conforme observável na figura 6.17, exhibe, ao longo dos 8594 passos de integração, um comportamento oscilatório; de facto, existe uma diferença relativamente aos resultados obtidos com o método Störmer-Verlet geral, já que com este último, na grande maioria do processo de integração, a Hamiltoniana era praticamente constante, existindo uns «picos esporádicos». Agora, embora a Hamiltoniana tenha uma amplitude de variação na ordem das 2 unidades, o seu valor numérico não é, em nenhum intervalo, estável, mas é constantemente oscilatório. O valor numérico da função Hamiltoniana modificada também é, de todo em todo, oscilatório, embora a amplitude de variação seja de 0.06.

Ao longo dos 8594 passos do processo de integração, o passo de integração foi, efectivamente,

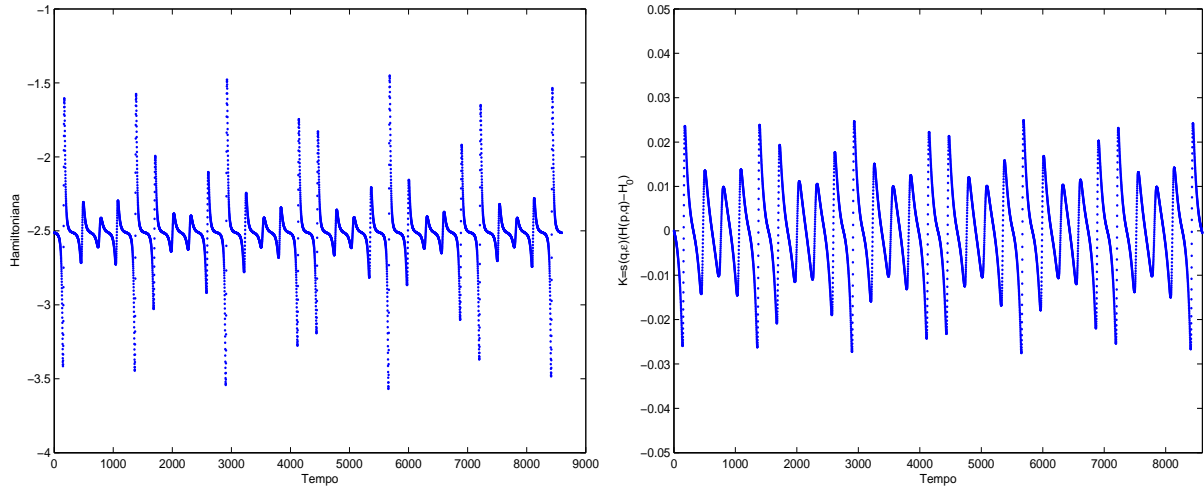


Figura 6.17: Evolução da Hamiltoniana e da Hamiltoniana modificada, respectivamente, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

adaptativo, já que variou, embora exibindo um certo padrão de comportamento, tal como a figura 6.18 ilustra. O passo mínimo foi de $h = 1.6256 \times 10^{-4}$ e o passo máximo foi de $h = 0.0045$.

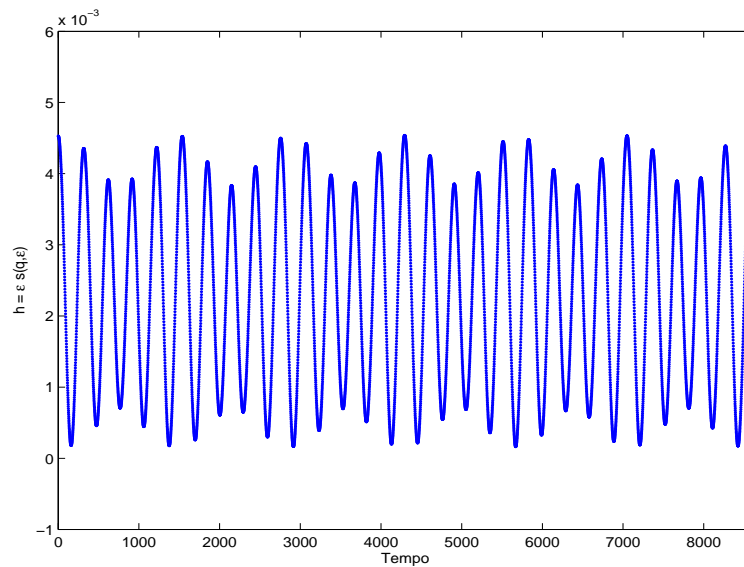


Figura 6.18: Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simpléctico adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

Assuma-se agora $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{3}{4}$, o que para posições próximas da origem produz um passo de integração menor do que o caso anterior. O objectivo será verificar se os resultados reproduzem melhor o retrato da fase, à medida que r aumenta.

A trajectória do terceiro corpo está representada na figura 6.19, sendo visível que os resultados

numéricos são idênticos aos já obtidos, quer com $r = \frac{1}{2}$, quer com os métodos simpléticos com passo de integração fixo.

No entanto, o comportamento da função Hamiltoniana melhora relativamente à simulação numérica com $r = \frac{1}{2}$, já que a sua amplitude de variação é de apenas 0.35, em contraste com as

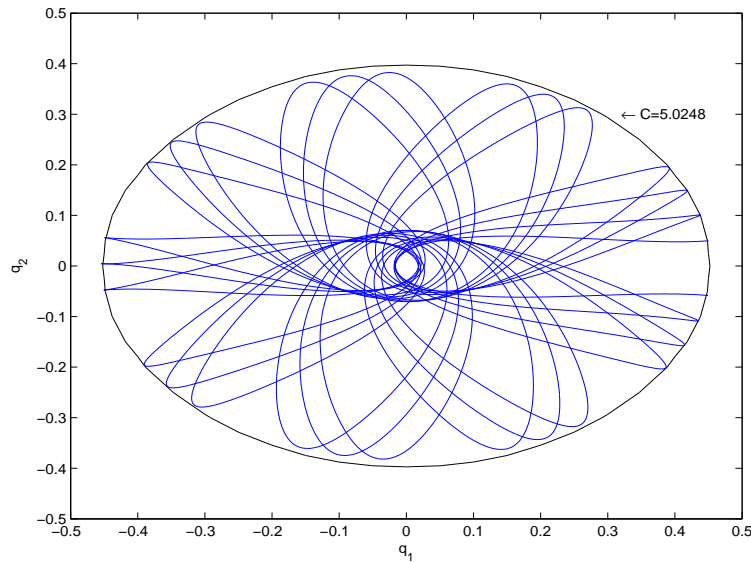


Figura 6.19: Trajectória do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método de Euler simplético adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{3}{4}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

2 unidades do caso anterior. A sua evolução continua oscilatória ao longo de todo o processo de integração. A função Hamiltoniana modificada apresenta uma evolução semelhante (ver figura

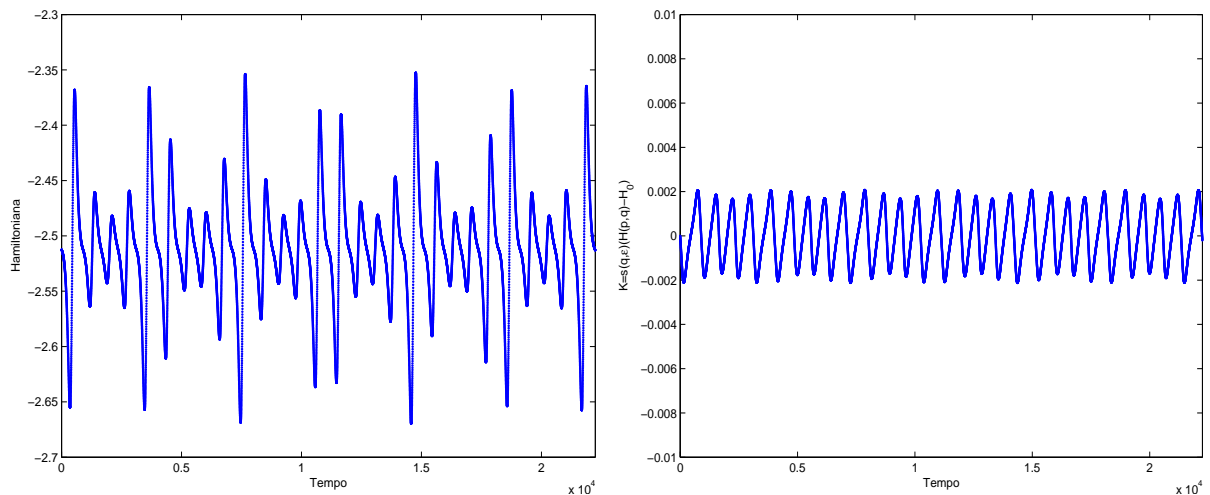


Figura 6.20: Evolução da Hamiltoniana e da Hamiltoniana modificada, respectivamente, no problema de Hill, com o método de Euler simplético adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{3}{4}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

6.20). A sua amplitude de variação é de apenas 0.004, quando comparada com o caso anterior, exibindo agora uma amplitude de variação de cerca de 7% da anterior.

O passo de integração é fortemente adaptativo, ao longo dos 22242 passos, atingindo um mínimo

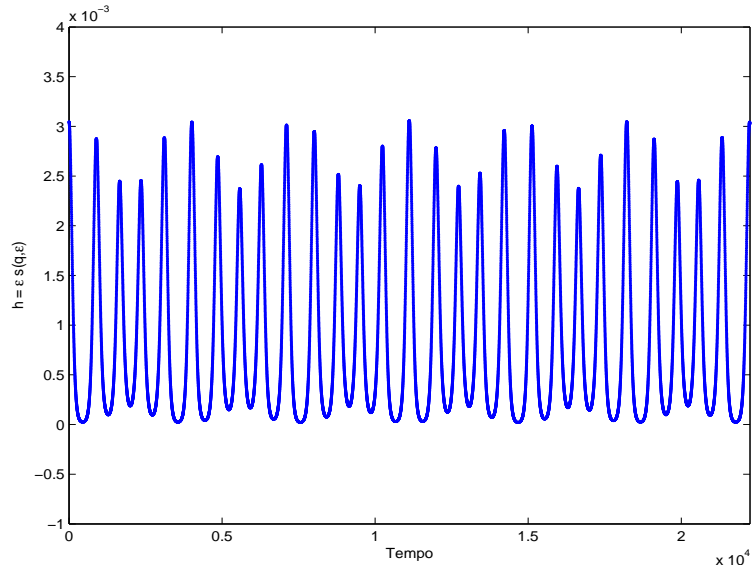


Figura 6.21: Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simplético adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{3}{4}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

de $h = 2.0877 \times 10^{-5}$ e um máximo de 0.0031. Note-se que, quando comparado com o caso anterior, o passo de integração máximo e mínimo diminuíram.

Admita-se que $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$.

O processo de integração foi composto por 71191 passos. A observação da figura 6.22 é conclusiva quanto à manutenção da semelhança das trajectórias numéricas produzidas; aliás, tal inferência abrange os resultados concernentes a trajectórias numéricas produzidas por todos os métodos simpléticos aqui apresentados. A diferença visível a olho nu não é ao nível das trajectórias, mas ao nível da evolução da função Hamiltoniana. Quando $r = 1$, a Hamiltoniana exhibe um comportamento oscilatório ao longo do processo de integração, mas a amplitude da sua variação baixou para as 2 casas decimais, na ordem dos 0.06. Quanto à Hamiltoniana modificada, a sua amplitude de variação ascende aos 6×10^{-4} , ou seja, é 100 vezes menor (ver figura 6.23).

Ao longo dos 71191 passos que compõem o processo de integração, o passo de integração mínimo foi de $h = 0.0021$ e o passo de integração máximo ascendeu aos 2.672×10^{-6} . A figura 6.24 indica claramente que o passo foi, realmente, adaptativo; no entanto, predominam os passos de integração mais baixos ao longo do processo de integração, ou dito com um certo abuso na linguagem, «o passo foi mais vezes mais baixo do que mais alto».

Olhando de uma forma global para os resultados numéricos obtidos com o método de Euler simplético adaptativo, para $r = \frac{1}{2}$, $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$ ($r = 0$ corresponde ao método de Euler simplético com passo de integração fixo), pode dizer-se que:

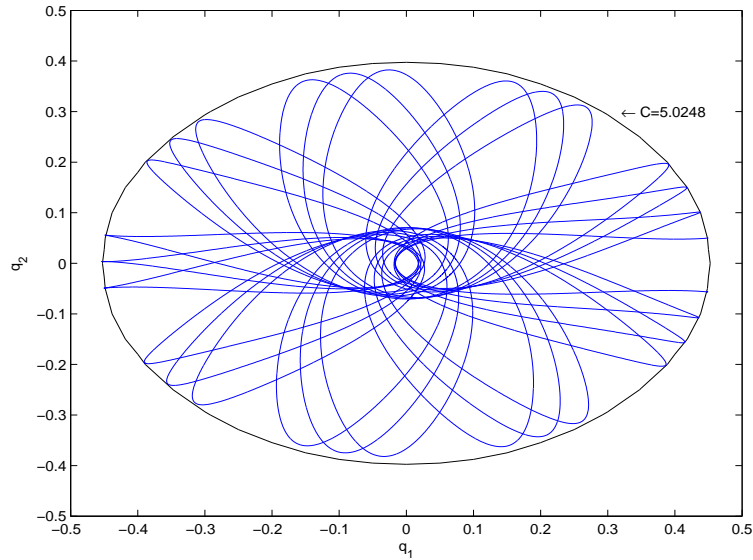


Figura 6.22: Trajectória do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método de Euler simplético adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

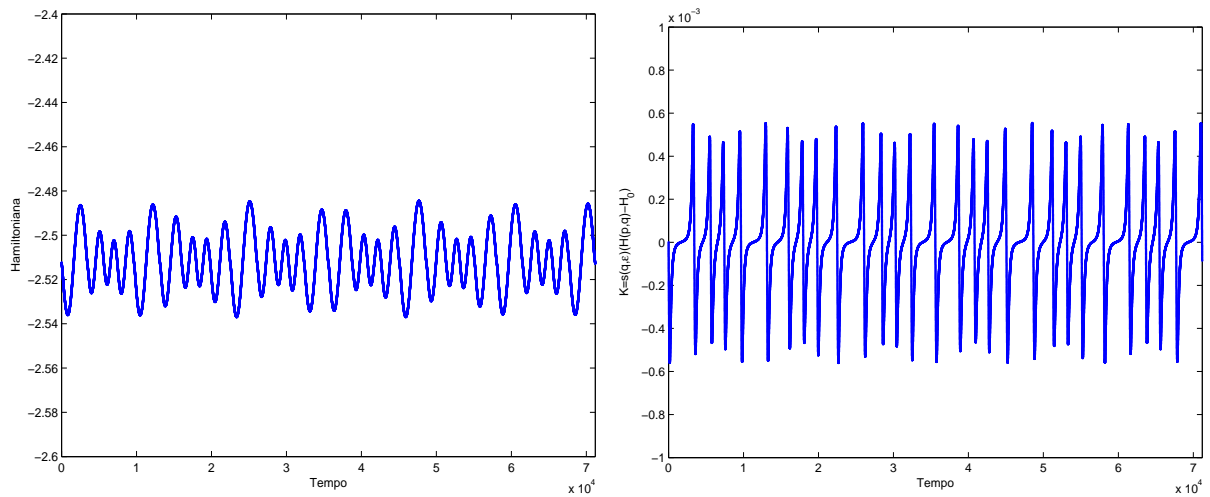


Figura 6.23: Evolução da Hamiltoniana e da Hamiltoniana modificada, respectivamente, no problema de Hill, com o método de Euler simplético adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

1. as trajectórias numéricas são, grosso modo, muito similares;
2. a função Hamiltoniana é sempre oscilatória mas, à medida que r aumenta, a sua amplitude de variação diminui, reproduzindo melhor o retrato da fase;
3. o passo de integração é, na realidade, variável ao longo de todo o processo de integração mas, com excepção de $r = \frac{1}{2}$, onde o passo foi tantas vezes alto como baixo, nos outros dois casos, predominaram os passos de integração mais baixos;

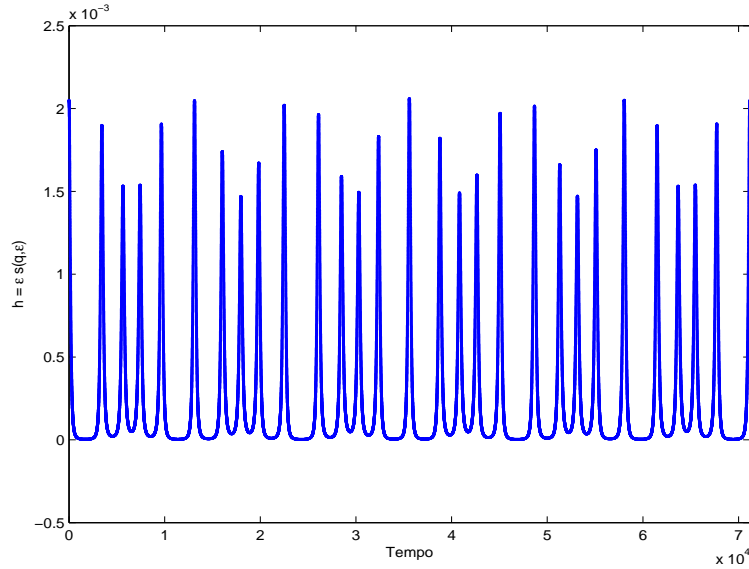


Figura 6.24: Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simplético adaptativo; considerou-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$.

4. quando comparado com o método de Euler simplético com passo de integração constante e igual a 10^{-3} , os resultados obtidos com o método adaptativo são sempre superiores em termos da amplitude da variação da função Hamiltoniana; no caso do passo constante de 10^{-4} , tal só acontece para $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$;
5. quando comparado com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração constante e igual 10^{-3} , os resultados deste em termos da evolução da função Hamiltoniana, são superiores quando $r = \frac{1}{2}$ e inferiores quando $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$; se 10^{-4} , os resultados do método de ordem 2 são-lhe sempre favoráveis.

Para terminar esta secção, testa-se o cenário $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$, de forma a verificar-se o efeito de um aumento em ε .

Conforme seria de esperar, o número de passos, relativamente ao cenário $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{1}{2}$, foi multiplicado, grosso modo, por 10: passou de 8594 passos para 85943 passos. O passo de integração mínimo e máximo foram como que divididos por 10: o passo mínimo era $1,6256 \times 10^{-4}$ e passou para 1.6329×10^{-5} ; o passo máximo era 0.0045 e passou para 4.5382×10^{-4} .

A trajectória do terceiro corpo é semelhante à obtida na figura 6.16, quando $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = \frac{1}{2}$, ao passo que a função Hamiltoniana evolui de forma análoga à volta do valor -2.5 , isto é, exibindo um comportamento oscilatório; no entanto, enquanto que com $\varepsilon = 10^{-2}$ a variação é de, grosso modo, 1 unidade em cada sentido, com $\varepsilon = 10^{-3}$ a variação é somente de 1 décima em cada sentido.

Estes resultados seriam de esperar já que, à medida que o passo de integração diminui, a evolução da Hamiltoniana aproxima-se da evolução da Hamiltoniana subjacente ao sistema de equações

diferenciais. Todavia, paga-se o preço desse decréscimo no passo de integração, em termos de esforço computacional e de tempo. Será desejável chegar, então, a um compromisso razoável entre o tamanho do passo de integração e dos recursos a alocar à resolução de determinado problema. Neste caso particular da integração numérica do problema de Hill quando $C > \frac{4}{3}$, e em face dos resultados obtidos, será razoável fixar ε em $\varepsilon = 10^{-2}$ e adaptar o passo via r .

6.3.3 O método Störmer-Verlet adaptativo para Hamiltonianas não separáveis

O método Störmer-Verlet que integra sistemas hamiltonianos com Hamiltonianas não separáveis tem, de forma análoga ao método de Euler simplético, uma versão adaptativa, isto é, uma versão com passo de integração variável.

Aplicar-se o integrador Störmer-Verlet, com passo de integração dependente de q , ao sistema hamiltoniano

$$\begin{aligned}\frac{dp}{d\tau} &= -s(q, \varepsilon)H_q(p, q) - s_q(q, \varepsilon)(H(p, q) - H_0) \\ \frac{dq}{d\tau} &= s(q, \varepsilon)H_p(p, q).\end{aligned}\tag{6.32}$$

O método Störmer-Verlet para este sistema é dado por

$$\begin{aligned}p_{n+\frac{1}{2}} &= p_n - \frac{\varepsilon}{2}s(q_n, \varepsilon)H_q(p_{n+\frac{1}{2}}, q_n) - \frac{\varepsilon}{2}s_q(q_n, \varepsilon)(H(p_{n+\frac{1}{2}}, q_n) - H_0) \\ q_{n+1} &= q_n + \frac{\varepsilon}{2}s(q_n, \varepsilon)H_p(p_{n+\frac{1}{2}}, q_n) + \frac{\varepsilon}{2}s(q_{n+1}, \varepsilon)H_p(p_{n+\frac{1}{2}}, q_{n+1}) \\ p_{n+1} &= p_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\varepsilon}{2}s(q_{n+1}, \varepsilon)H_q(p_{n+\frac{1}{2}}, q_{n+1}) - \frac{\varepsilon}{2}s_q(q_{n+1}, \varepsilon)(H(p_{n+\frac{1}{2}}, q_{n+1}) - H_0).\end{aligned}\tag{6.33}$$

Inserindo as expressões para H_q e H_p no sistema 6.33, obtém-se

$$\begin{aligned}p_{n+\frac{1}{2}} &= p_n - \frac{\varepsilon}{2}s(q_n) \left(J^T p_{n+\frac{1}{2}} + Aq_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2}s_q(q_n) \left(\frac{1}{2}\|p_{n+\frac{1}{2}}\|^2 - q_n^T J p_{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}q_n^T Aq_n - \frac{1}{\|q_n\|} - H_0 \right) \\ q_{n+1} &= q_n + \frac{\varepsilon}{2}s(q_n) \left(p_{n+\frac{1}{2}} + Jq_n \right) + \frac{\varepsilon}{2}s(q_{n+1}) \left(p_{n+\frac{1}{2}} + Jq_{n+1} \right) \\ p_{n+1} &= p_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\varepsilon}{2}s(q_{n+1}) \left(J^T p_{n+\frac{1}{2}} + Aq_{n+1} + \frac{q_{n+1}}{\|q_{n+1}\|^3} \right) \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2}s_q(q_{n+1}) \left(\frac{1}{2}\|p_{n+\frac{1}{2}}\|^2 - q_{n+1}^T J p_{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}q_{n+1}^T Aq_{n+1} - \frac{1}{\|q_{n+1}\|} - H_0 \right).\end{aligned}\tag{6.34}$$

A primeira equação é similar à primeira equação de 6.31, e pode ser resolvida para $p_{n+\frac{1}{2}}$ de maneira análoga. Resulta

$$p_{n+\frac{1}{2}} = \left(I + \frac{\varepsilon}{2} s(q_n) J^T - \frac{\varepsilon}{2} s_q(q_n) q_n^T J \right)^{-1} \left[p_n - \frac{\varepsilon}{2} s(q_n) \left(A q_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) - \frac{\varepsilon}{2} s_q(q_n) \left(\frac{1}{2} \|p_{n+\frac{1}{2}}\|^2 + \frac{1}{2} q_n^T A q_n - \frac{1}{\|q_n\|} - H_0 \right) \right].$$

Esta é uma equação quadrática em $p_{n+\frac{1}{2}}$, e pode ser resolvida, tal como anteriormente, por se considerar a norma

$$\|p_{n+\frac{1}{2}}\|_2^2 = p_{n+\frac{1}{2}}^T p_{n+\frac{1}{2}}$$

e calcular a quantidade escalar $\beta = \|p_{n+\frac{1}{2}}\|_2^2$ a partir da relação

$$\beta = \left\| \left(I + \frac{\varepsilon}{2} s(q_n) J^T - \frac{\varepsilon}{2} s_q(q_n) q_n^T J \right)^{-1} \left[p_n - \frac{\varepsilon}{2} s(q_n) \left(A q_n + \frac{q_n}{\|q_n\|^3} \right) - \frac{\varepsilon}{2} s_q(q_n) \left(\frac{1}{2} \beta + \frac{1}{2} q_n^T A q_n - \frac{1}{\|q_n\|} - H_0 \right) \right] \right\|_2.$$

Neste momento, $p_{n+\frac{1}{2}}$ pode ser determinado de forma explícita em 6.34 e, tal como no caso do método de Euler simplético com passo de integração variável, os coeficientes para a equação quadrática associada constam dos programas em Matlab, que seguem no apêndice A.

A segunda equação de 6.34 é implícita em q_{n+1} . A estratégia para contornar este obstáculo é rearranjar a equação, obtendo-se

$$q_{n+1} = \left(I - \frac{\varepsilon}{2} s(q_{n+1}) J \right)^{-1} \left(q_n + \frac{\varepsilon}{2} (s(q_n) + s(q_{n+1})) p_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\varepsilon}{2} s(q_n) J q_n \right). \quad (6.35)$$

Seja $s(q_{n+1}, \varepsilon) = \gamma$ e considere-se a equação escalar não linear

$$\gamma = s \left(\left(I - \frac{\varepsilon}{2} \gamma J \right)^{-1} \left(q_n + \frac{\varepsilon}{2} (s(q_n) + \gamma) p_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\varepsilon}{2} s(q_n) J q_n \right) \right), \quad (6.36)$$

a qual pode ser resolvida para γ . Em particular, se $s(q, \varepsilon) = (q^T q)^r \equiv \|q\|_2^{2r}$, para algum $0 \leq r \leq 1$. Então,

$$\gamma = \left\| \left(I - \frac{\varepsilon}{2} \gamma J \right)^{-1} \left(q_n + \frac{\varepsilon}{2} (s(q_n) + \gamma) p_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\varepsilon}{2} s(q_n) J q_n \right) \right\|_2^{2r}, \quad (6.37)$$

a qual pode ser resolvida pelo método de Newton, resolvendo-se a equação não linear

$$f(\gamma) = \gamma - \left\| \left(I - \frac{\varepsilon}{2} \gamma J \right)^{-1} \left(q_n + \frac{\varepsilon}{2} (s(q_n) + \gamma) p_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\varepsilon}{2} s(q_n) J q_n \right) \right\|_2^{2r} = 0, \quad (6.38)$$

atendendo a que f_γ está disponível. A expressão desta derivada pode ser encontrada nos programas em Matlab, que seguem no apêndice A.

O algoritmo 6.34 fornece aproximações em t_n , onde

$$t_{n+1} = t_n + \frac{\varepsilon(s(q_n) + s(q_{n+1}))}{2}.$$

6.3.4 Resultados numéricos com o método Störmer-Verlet adaptativo

Nesta subsecção, o método Störmer-Verlet adaptativo irá ser implementado para as mesmas condições iniciais e com os mesmos valores para os parâmetros r e ε da implementação feita com o método de Euler simplético adaptativo, de forma a ser legítimo comparar os resultados numéricos produzidos por ambos os métodos.

Considere-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e, um por vez, $r = \frac{1}{2}$, $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$, para uma integração em $t \in [0; 20]$. A constante de Jacobi associada a estas condições iniciais é $C = 5.02476$.

Na figura 6.25 constam as trajectórias produzidas pelo método, para $r = \frac{1}{2}$, $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$, respectivamente, da esquerda para a direita. As trajectórias produzidas pelo método são, após

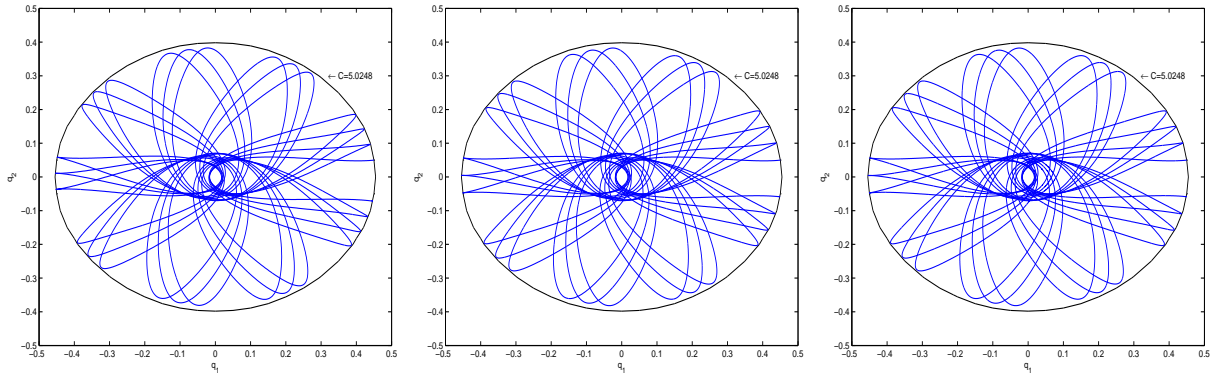


Figura 6.25: Trajectória do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet adaptativo, para $r = \frac{1}{2}$, $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com $\varepsilon = 10^{-2}$.

inspecção visual, similares. No primeiro caso, o método integrou durante 8594 passos, no segundo caso, durante 22244 passos e, no último, durante 71212 passos. Como a observação da figura 6.25 é inconclusiva quanto à comparação dos resultados obtidos, torna-se necessário avançar para a análise da evolução da função Hamiltoniana ao longo do processo de integração. Observe-se a figura 6.27. Nos 3 casos, a Hamiltoniana volta repetidamente ao valor assumido no instante inicial, H_0 , exibindo um comportamento de acordo com o indicado pela literatura, no sentido que oscila em torno do valor inicial, sendo irrelevante que oscile sempre no mesmo sentido. Pode dizer-se, então, que os três casos produzem resultados numéricos satisfatórios na integração do sistema hamiltoniano.

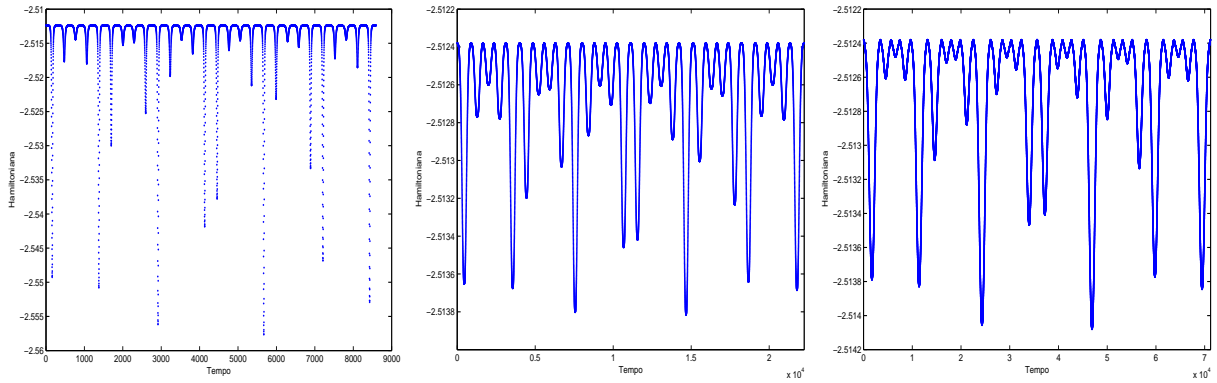


Figura 6.26: Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet adaptativo, para $r = \frac{1}{2}$, $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com $\varepsilon = 10^{-2}$.

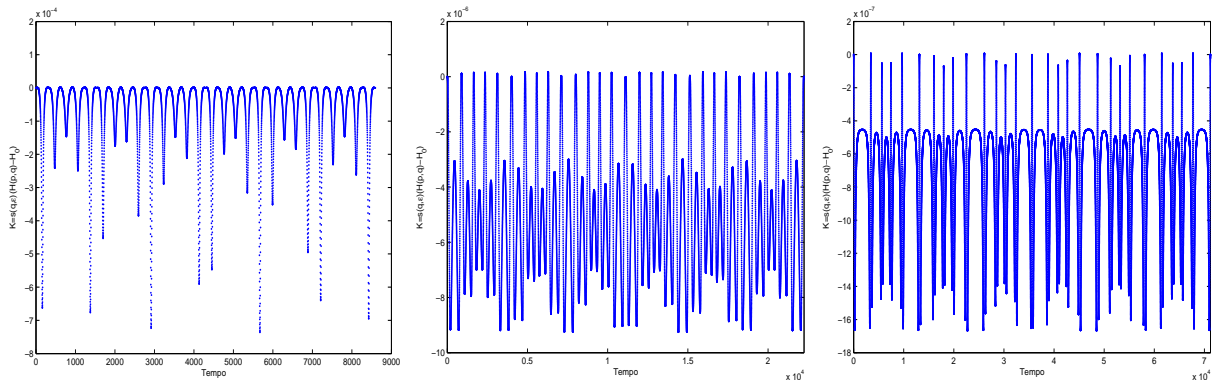


Figura 6.27: Evolução da Hamiltoniana modificada, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet adaptativo, para $r = \frac{1}{2}$, $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com $\varepsilon = 10^{-2}$.

No entanto, o caso de $r = \frac{1}{2}$, produz uma variação da Hamiltoniana na segunda casa decimal, ao passo que nos outros dois casos isso acontece somente na terceira casa decimal. A variação na Hamiltoniana nos casos $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$ é muito semelhante.

Em todos os três casos, a Hamiltoniana modificada não demonstra tendência de subida ou descida, mas varia em torno do seu valor numérico inicial, na ordem da quarta, sexta e sétima casa decimal, respectivamente (ver figura 6.27).

Naturalmente que os resultados obtidos dependem do passo de integração assumido pelo integrador, em cada instante da integração. Atente-se na figura 6.28. A observação da figura sugere que, com $r = \frac{1}{2}$, o passo de integração oscilou, no sentido que assumia, igualmente, os valores mais altos e os valores mais baixos, não existindo predomínio da produção de passos de integração muito baixos ou muito altos (no contexto da banda de valores assumidos pelo passo de integração). Com $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$, o passo de integração assumiu, em grande parte do processo, os valores mais baixos da banda de valores produzidos.

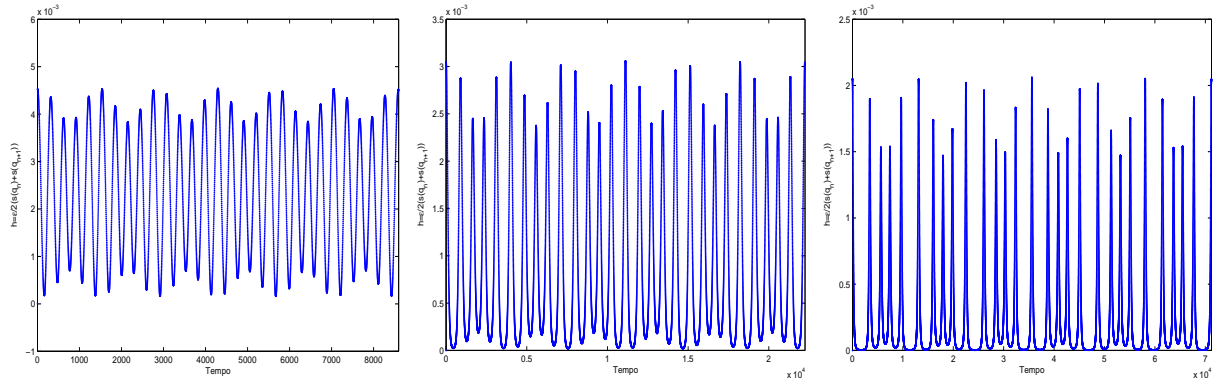


Figura 6.28: Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet adaptativo, para $r = \frac{1}{2}$, $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$, respectivamente. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.45, 0.05)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, com $\varepsilon = 10^{-2}$.

Com $r = \frac{1}{2}$, o passo mínimo foi de 1.6258×10^{-4} e o máximo de 0.0045. Com $r = \frac{3}{4}$, o passo mínimo foi de 2.6855×10^{-5} e o máximo de 0.0031. Com $r = 1$, o passo mínimo foi de 2.6651×10^{-6} e o máximo de 0.0021. Comparando o método de Euler simpléctico com o método Störmer-Verlet, ambos na sua versão adaptativa, pode dizer-se que:

1. para todos os cenários, isto é, para as integrações numéricas com os diferentes valores de r , o número de passos do processo de integração, o passo de integração mínimo e o passo de integração máximo ou coincidem ou são quase coincidentes;
2. a evolução genérica da função Hamiltoniana apresenta resultados satisfatórios, oscilando à volta do seu valor inicial;
3. embora a variação da Hamiltoniana seja aceitável para todas as integrações numéricas efectuadas em ambos os métodos, a variação desta função no método de ordem 2 é sempre menor, em cada caso: 0.045 unidades contra 2 unidades, quando $r = \frac{1}{2}$; 0.0014 unidades contra 0.35 unidades, quando $r = \frac{3}{4}$; 0.0016 unidades contra 0.06 unidades quando $r = 1$;
4. devido aos resultados obtidos com a evolução da Hamiltoniana, o método Störmer-Verlet adaptativo é preferível ao método de Euler simpléctico;
5. o tempo de correr ambos os métodos no computador é, praticamente, idêntico.

6.4 Integração numérica no caso da possibilidade de escape

Nesta secção, o problema de Hill será integrado numericamente, para o caso em que $C < 3^{\frac{4}{3}}$, isto é, quando se abre a possibilidade de escape. Note-se que é, apenas, uma possibilidade, já que mesmo quando a curva de Hill está aberta, não há a garantia que o terceiro corpo necessariamente

escape [15].

O problema de Hill será integrado para três condições iniciais diferentes:

1. $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, originando uma constante de Jacobi igual a $C = 4.1304$;
2. $(q_1, q_2) = (0.36, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, originando uma constante de Jacobi igual a $C = 4.1053$;
3. $(q_1, q_2) = (0.5, 0.5)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, originando uma constante de Jacobi igual a $C = 3.5784$,

pelo método Störmer-Verlet geral com passo de integração fixo, pelo método de Euler simplético e pelo método Störmer-Verlet, ambos com passo de integração adaptativo.

Considere-se $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, para $t \in [0, 30]$.

A figura 6.29 mostra que as trajectórias numérica produzidas pelos três métodos são, em termos visuais, idênticas. Note-se que, neste caso, no fim do processo de integração, ao fim de 300000

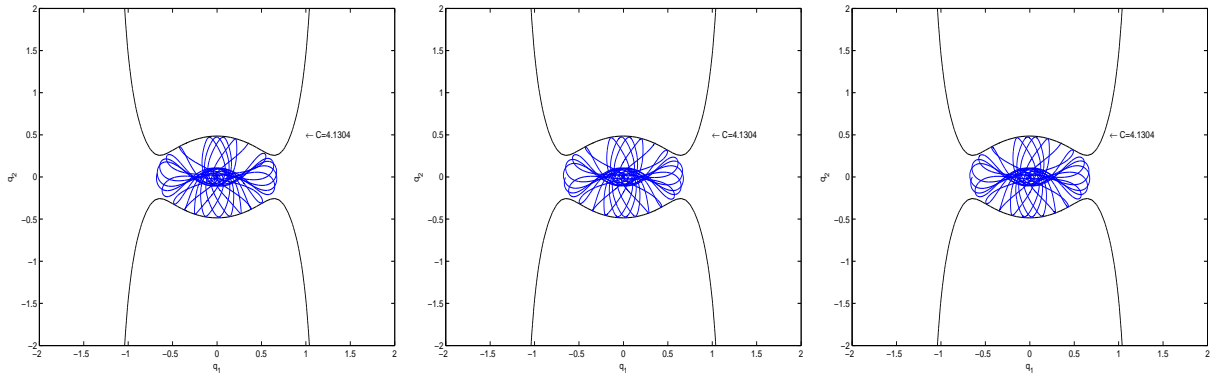


Figura 6.29: Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 30]$.

passos, no método com passo de integração fixo, 67023 passos no método de Euler simplético adaptativo, e 67036 passos no método Störmer-Verlet adaptativo, o corpo ainda não tinha escapado. Todavia, tal não significa que o corpo não irá, eventualmente, escapar. A decisão de correr os métodos para $t \in [0, 30]$ prende-se com o saber se, no longo prazo, a órbita escapa, mas os resultados são inconclusivos neste sentido (ainda não ocorreu em $t = 30$, mas pode acontecer posteriormente)

A análise da evolução da função Hamiltoniana torna possível avançar na comparação dos resultados numéricos. No método Störmer-Verlet geral, a Hamiltoniana evolui de uma forma estável,

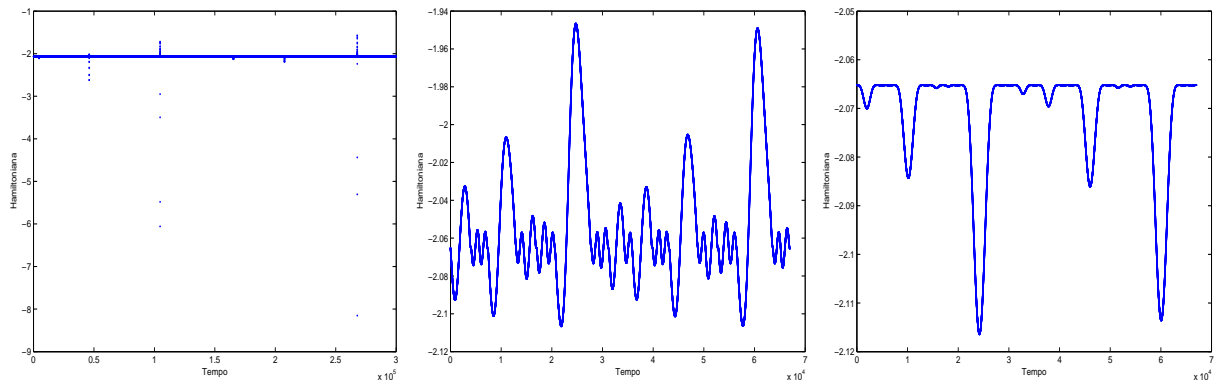


Figura 6.30: Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 30]$.

com variações máximas na ordem das unidades, ao longo dos 300000 passos de integração, isto é, no longo prazo. No entanto, o método de Euler simplético adaptativo, nas condições enunciadas, exhibe uma evolução mais interessante, ou seja, um comportamento oscilatório e, de certa forma, cíclico, mas com variações máximas na ordem da primeira casa decimal. O passo de integração mínimo foi de 1.575×10^{-7} e o máximo ascendeu a 0.0046. Já com o método Störmer-Verlet adaptativo, a evolução da função Hamiltoniana é sempre no mesmo sentido, facto que, por si só, é irrelevante; o pertinente é a magnitude do desvio da Hamiltoniana numérica relativamente ao seu valor em $t = 0$. Neste particular, o método de ordem 2 exhibe um comportamento ligeiramente mais favorável (variação máxima da Hamiltoniana de 0.05, contra 0.11 no método de ordem 1). O método de ordem superior integrou com um passo mínimo de 1.6024×10^{-7} e com um passo máximo de 0.0046. A figura 6.31 mostra que a evolução do passo de integração, ao longo do processo, foi semelhante em ambos os métodos.

Considere-se $(q_1, q_2) = (0.36, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, para $t \in [0, 10]$.

Quando se integra pelo método de Euler simplético adaptativo nas condições supracitadas, isto é, $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$, a função Hamiltoniana, no final do processo, exhibe uma variação significativa, na ordem das 80 unidades, indicando a produção de resultados inaceitáveis. A explicação deste comportamento da Hamiltoniana reside na evolução do passo de integração; os resultados revelam um passo máximo de 2.1833. Uma justificação plausível prende-se com a forma como se define h : o passo de integração é função da distância do corpo à origem; logo, as condições utilizadas, $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$, produzem normas de tal modo significativas que inviabilizam a produção de resultados numéricos aceitáveis.

O contornar esta situação passa pelo controlo do passo de integração via redução de r e aumento de ε , de uma forma equilibrada, ou seja, faz-se um compromisso entre a variação efectuar em r e ε , de forma a obter resultados aceitáveis com recursos computacionais e de tempo não

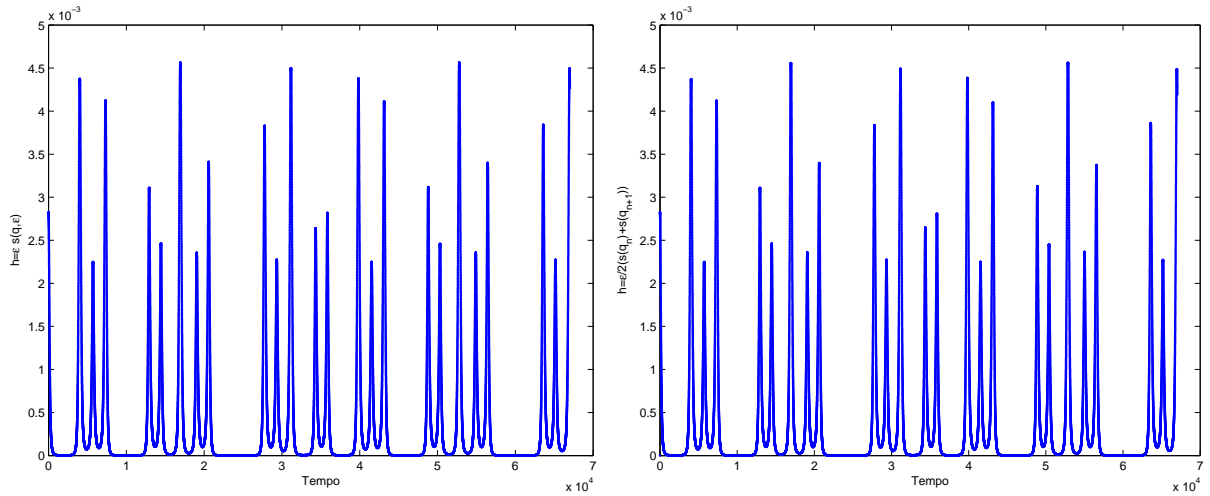


Figura 6.31: Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, ambos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 30]$.

muito onerosos. Após várias tentativas de encontrar a melhor combinação de ε e r , tanto para o método de Euler simplético como para o método Störmer-Verlet, optou-se pela combinação $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = 1$. As trajectórias produzidas pelos 3 métodos estão representadas na figura 6.32. A diferença marcante relativamente ao caso anterior, é o escape do corpo; os métodos exibem trajectórias visualmente semelhantes.

A observação da evolução da função Hamiltoniana (ver figura 6.33) permite concluir que, em termos genéricos, a função evolui conforme esperado, ou seja, oscilatória à volta de o seu valor

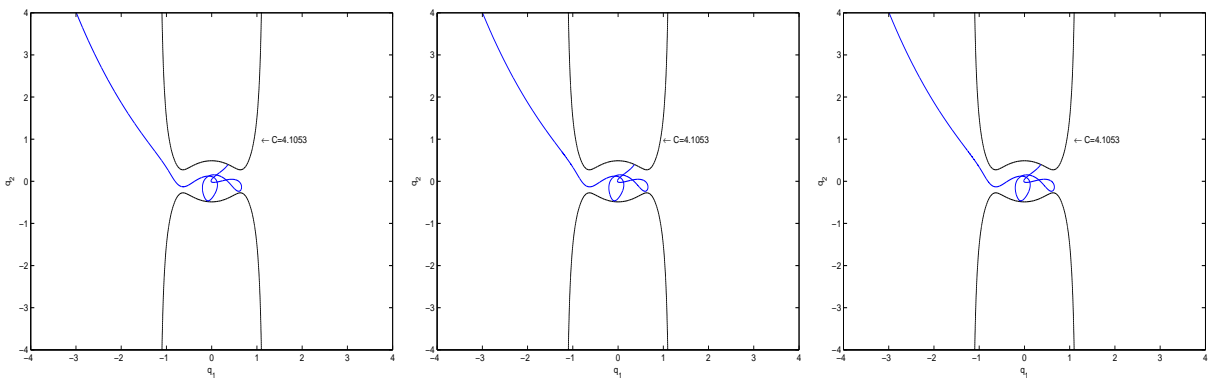


Figura 6.32: Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.36, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 10]$.

inicial, não exibindo nenhuma tendência de subida ou de descida. Com a integração com passo fixo, a Hamiltoniana é, na esmagadora maioria do processo, estável até à segunda casa decimal,

só exibindo uma oscilação maior, na ordem dos 0.0425. Já os métodos com passo de integração variável, demonstram, no final do processo, uma variação mais acentuada desta função; tal registo estará associado a um incremento do passo de integração, à medida que o corpo se afasta cada vez mais da origem. No entanto, até $t = 10$, que corresponde a 13818 passos no método de Euler, e a 13820 passos no método Störmer-Verlet, os resultados obtidos quanto à Hamiltoniana são satisfatórios. Na realidade, a variação máxima exibida é, no método de ordem 1, de 0.225

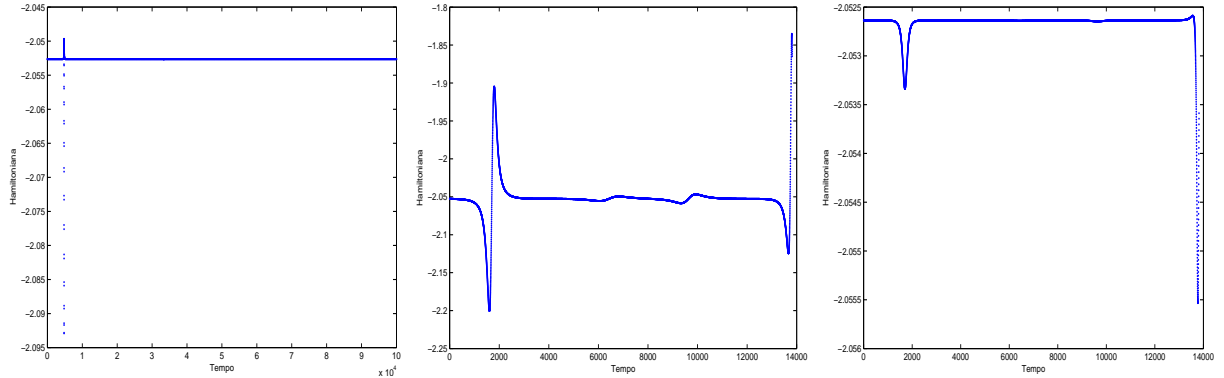


Figura 6.33: Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 30]$.

unidades e, no método de ordem 2, de 0.003 unidades, ambas no final do processo de integração. A figura 6.34 ilustra a evolução do passo de integração dos métodos adaptativos. O método de

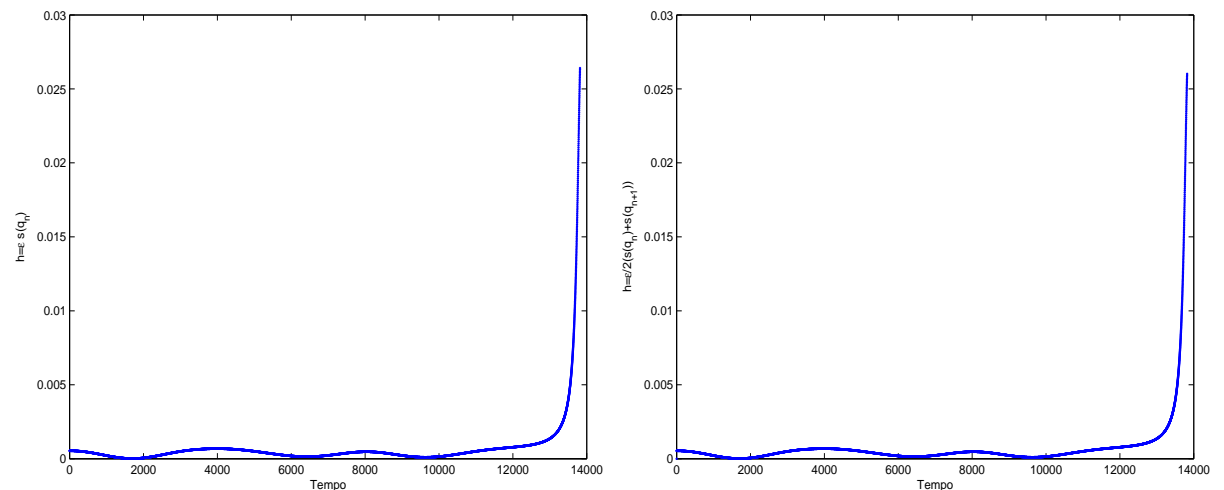


Figura 6.34: Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, ambos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.35, 0.4)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 30]$.

Euler integrou com um passo mínimo de 1.3153×10^{-5} e com um passo máximo de 0.0264. O

método Störmer-Verlet produziu, como passo mínimo, o valor de 1.3147×10^{-5} e como passo máximo o valor de 0.026. Pode dizer-se que o passo de integração não variou de forma uniforme ao longo do processo, mas assumiu valores relativamente baixos até cerca de 90% da simulação e, a partir daí, o passo começou a crescer. Tal facto poderá ser a justificação dos resultados da função Hamiltoniana na parte final da integração numérica.

As condições iniciais seguintes são diversas das duas anteriores, no sentido que o escape do corpo dá-se quase imediatamente. Considere-se $(q_1, q_2) = (0.5, 0.5)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$, para $t \in [0, 10]$.

Quando se implementa o método de Euler simpléctico com $\varepsilon = 10^{-2}$ e $r = 1$, as condições mais favoráveis no caso de $C > \frac{3}{4}$, o método produz um passo de integração máximo de 98.52, implicando a rejeição dos resultados obtidos. Novamente, o controlo do passo de integração passa por um compromisso entre os valores de r e de ε , adoptando-se, novamente, $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As trajectórias produzidas pelos 3 métodos estão na figura 6.35 e, conforme se observa, elas são muito similares. O método de passo fixo correu para 100000 passos, e os métodos de

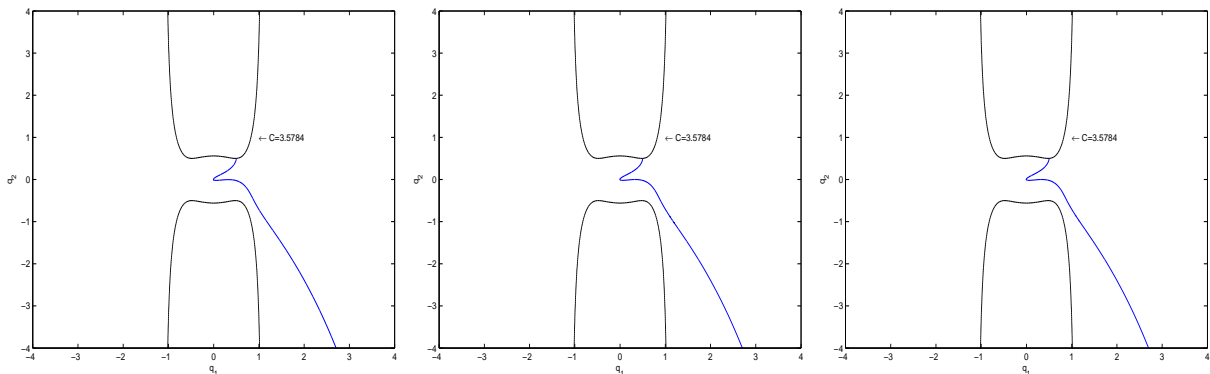


Figura 6.35: Trajectórias do terceiro corpo, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simpléctico e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.5, 0.5)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 10]$.

Euler simpléctico e Störmer-Verlet para 5640 e 5644 passos, respectivamente. A evolução da Hamiltoniana está patente na figura 6.36. Todos os métodos exibem uma evolução desta função dentro do que seria de esperar, em virtude de serem métodos simplécticos a integrar sistemas hamiltonianos. O integrador de passo fixo apresenta uma Hamiltoniana muito estável à volta de H_0 , com uma variação máxima, num caso pontual, de 0.7 unidades. No método de Euler simpléctico adaptativo, a Hamiltoniana oscila em torno de H_0 , com uma variação máxima de 0.4 unidades em cada sentido. O método de ordem 2 com passo variável revela uma Hamiltoniana estável, com uma variação máxima de 0.0028 unidades; enfatize-se, novamente, que a variação sempre no mesmo sentido é irrelevante, sendo o importante o voltar repetidamente à vizinhança de H_0 .

Para aferir a evolução do passo de integração, observe-se a figura 6.37. Ambos os métodos exibem a mesma tendência no que concerne a este item; na maioria do processo, o passo de inte-

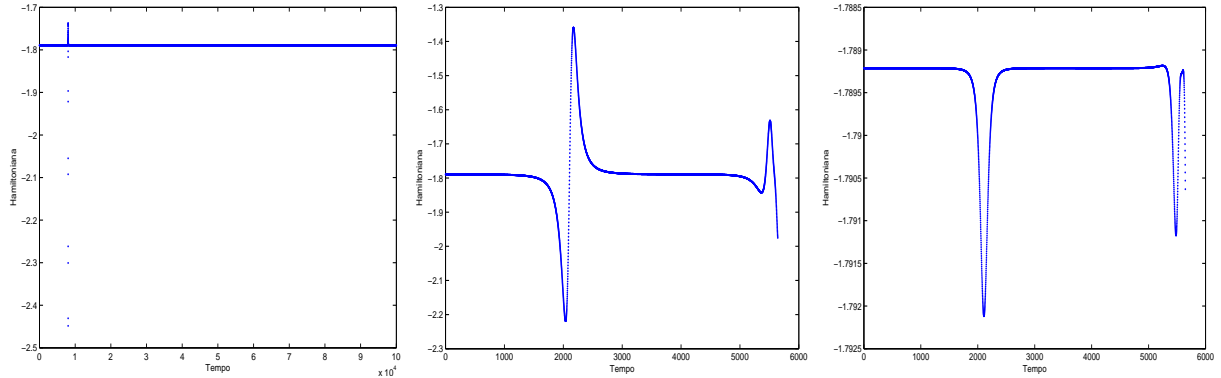


Figura 6.36: Evolução da Hamiltoniana, no problema de Hill, com o método Störmer-Verlet geral com passo de integração $h = 10^{-4}$, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, estes dois últimos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.5, 0.5)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 10]$.

gração é relativamente baixo e estável numa banda apertada mas, no final do processo, o passo sobe de forma significativa. No integrador de ordem 1, o passo mínimo foi de 6.5275×10^{-6} e o

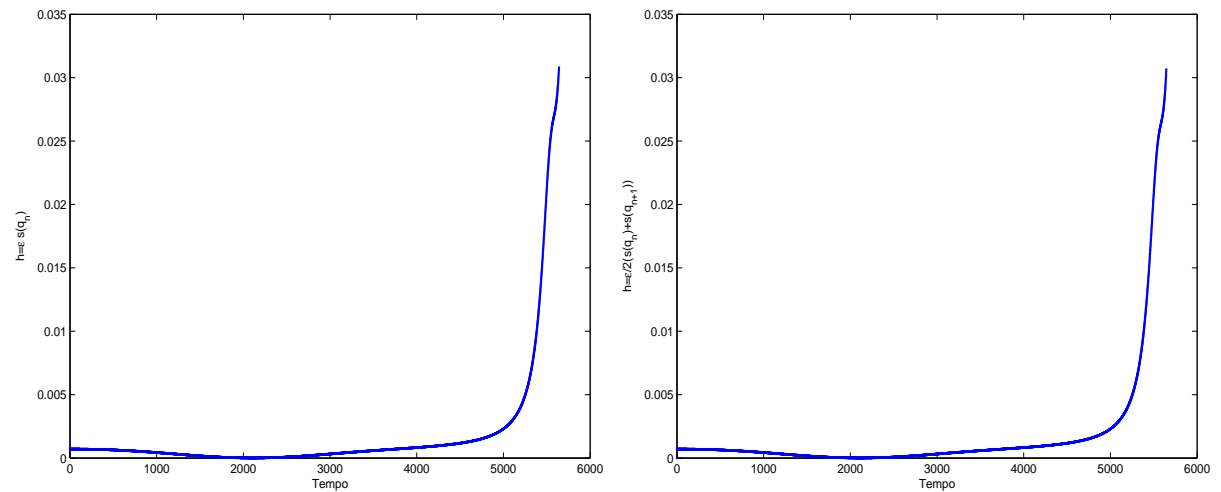


Figura 6.37: Evolução do passo de integração, no problema de Hill, com o método de Euler simplético e com o Störmer-Verlet, ambos adaptativos, considerando-se $\varepsilon = 10^{-3}$ e $r = \frac{1}{2}$. As condições iniciais são $(q_1, q_2) = (0.5, 0.5)$ e $(\dot{q}_1, \dot{q}_2) = (0, 0)$ e integrou-se para $t \in [0, 10]$.

máximo de 0.0308. No integrador de ordem 2, o passo mínimo foi de 6.5173×10^{-6} e o máximo ascendeu a 0.0306.

Em síntese, no caso da possibilidade de escape, pode dizer-se que:

1. não é obrigatório que o corpo se escape; embora haja essa possibilidade, em virtude da

abertura das curvas de Hill, não há a garantia de que o corpo se movimente, cada vez para mais longe;

2. na integração de órbitas em que o corpo não escapa, os 3 métodos usados apresentam resultados satisfatórios no que concerne à evolução da função Hamiltoniana; no entanto, o método Störmer-Verlet adaptativo é o que apresenta menor variação em termos desta quantidade;
3. na integração de órbitas em que o corpo escapa, é necessário ajustar os parâmetros que influenciam a definição do passo de integração, de forma a evitar a produção de passos demasiado altos e que, conseqüentemente, põem em causa os resultados numéricos obtidos;
4. no caso da integração de órbitas em que o corpo escapa, o método de ordem 2 adaptativo é o que exhibe melhores resultados em termos da evolução da Hamiltoniana, embora todos os três métodos implementados apresentem resultados numéricos satisfatórios.

Capítulo 7

Conclusões

Os sistemas hamiltonianos são o modelo mais adequado para modelar uma grande variedade de sistemas físicos. Quando a solução geral de determinado sistema de equações diferenciais não existe ou não é conhecida, torna-se necessário recorrer a métodos numéricos para integrar esse sistema. Naturalmente, é preferível que o método numérico utilizado reproduza o retrato da fase, preservando a estrutura subjacente ao sistema a integrar, o que passa por preservar um leque de características qualitativas interessantes do sistema original. Algumas dessas características qualitativas fundamentais são a symplecticidade do fluxo hamiltoniano, a simetria, leis de conservação, comportamentos assintóticos e preservação dos pontos de equilíbrio.

Muitos métodos clássicos, tais como os métodos de Euler explícito e implícito, não são integradores geométricos. A literatura mostra que os integradores clássicos aplicados a sistemas hamiltonianos só produzem resultados numéricos aceitáveis em integrações de curto prazo. Em integrações de longo prazo, estes métodos produzem, nos exemplos apresentados, distorções nas trajetórias e na função Hamiltoniana. O método Runge-Kutta de ordem 4, embora demonstre resultados numéricos francamente melhores do que os dois métodos anteriores, apresenta, quando o passo de integração não é suficientemente pequeno, alguma dissipação artificial. De facto, a literatura mostra que este método não se inclui na classe dos integradores geométricos. Embora seja um integrador usado frequentemente em várias áreas do conhecimento, o seu uso na integração de sistemas hamiltonianos deve ser visto com cautela, já que, em geral, produz resultados numéricos com dissipação artificial.

O método de Euler simpléctico, a regra do ponto médio implícita e o método Störmer-Verlet, sendo o primeiro de ordem 1 e os últimos de ordem 2, são integradores simplécticos. São, por isso, métodos adequados para integrar sistemas com natureza hamiltoniana, facto evidente nos resultados numéricos obtidos na integração do problema de Hill. Todos os métodos produzem uma Hamiltoniana com uma evolução compatível com a literatura: embora não exactamente conservada, revela um comportamento oscilatório em torno do seu valor no instante inicial, não

demonstrando qualquer tendência. Tal significa que, em qualquer instante do processo de integração, a função Hamiltoniana numérica assume um valor próximo da função Hamiltoniana do sistema de equações diferenciais.

No caso particular da integração do problema de Hill, para $C > 3^{\frac{4}{3}}$, isto é, quando o movimento está circunscrito à região oval dentro da curva de Hill, todos os métodos simplécticos selecionados produzem trajectórias dentro dessa área (o método Runge-Kutta de ordem 4 também, embora revele dissipação artificial), ao passo que os métodos de Euler explícito e implícito produzem trajectórias que só no muito curto prazo permanecem nessa região. A diferença entre os resultados produzidos pelos métodos simplécticos reside na precisão obtida no cálculo da Hamiltoniana. O método de Euler simpléctico exibe uma precisão menor, o que é congruente com o facto de ser um método de ordem 1, ao passo que os outros dois são de ordem 2. Então, se for exigível uma precisão superior, a regra do ponto média implícita e o método Störmer-Verlet produzem resultados melhores. No entanto, quando a opção é pela regra do ponto médio implícita, deve ponderar-se o facto de este ser um método implícito, exigindo maiores recursos computacionais e de tempo, ao passo que o método de Euler simpléctico é um método explícito. Quanto à opção entre este método implícito e o método Störmer-Verlet, no caso da integração do problema de Hill, os resultados sugerem a opção pelo segundo método, já que este método é da mesma ordem e é explícito.

Neste caso em que o movimento está circunscrito a uma região do movimento fechada, e porque as trajectórias numéricas estão próximas da origem, os resultados podem ser melhorados pelo recurso a métodos numéricos com passo de integração variável. O método Störmer-Verlet, na sua versão adaptativa, com $r = \frac{3}{4}$ e $r = 1$ é o integrador que produz os resultados numéricos melhores, em termos da evolução da função Hamiltoniana. Tal não acontece para $r = \frac{1}{2}$, já que, neste cenário, o passo de integração mínimo produzido é superior a 10^{-4} e, então, o método na sua versão com passo de integração fixo e igual a 10^{-4} produz resultados superiores.

No caso da integração do problema de Hill quando há possibilidade de escape ($C < 3^{\frac{4}{3}}$, não é certo que os métodos adaptativos produzam resultados melhores do que a sua versão com passo de integração fixo. Quando o corpo, embora tenha essa possibilidade, não escapa, o método Störmer-Verlet adaptativo é o integrador que produz melhores resultados. No entanto, quando o corpo escapa, e porque cada vez mais se afasta da origem, foi necessário ajustar o passo de integração variável via ajuste no parâmetro ε , de $\varepsilon = 10^{-2}$ para $\varepsilon = 10^{-3}$; note-se que como $s(q) = (q^T q)^r$, à medida que o corpo se afasta, o passo de integração resultante é, cada vez, maior. Para os dois conjuntos de condições iniciais assumidos, o método de ordem 2 com passo de integração variável, foi o método que produziu melhores resultados.

Perspectivas de trabalho futuro

Para o problema que surgiu na integração do problema de Hill, no caso efectivo de escape, que se originou na produção, a partir de certa altura, de passos de integração cada vez maiores, numa primeira tentativa de o contornar, variou-se o parâmetro r . No entanto, em termos práticos, tal opção teve de ser abandonada, já que o tempo de integração era muito elevado. Numa segunda tentativa, fez-se variar o parâmetro ε , com os resultados numéricos que figuram no capítulo anterior.

Levanta-se a questão de modificar a expressão de $s(q)$: poderá ser $s(p)$, $s(q, p)$ ou, na mesma, $s(q)$, mas com uma expressão diferente.

Apêndice A

Programas

Os programas foram compilados em Matlab 7, usando um computador HP Compaq nx6110, com um processador Intel Pentium com 1.73 GHz e com RAM de 1 GB.

A.1 Método de Euler explícito

```
function [P,Q,H,E] = hill_euler(p,q,h,tmax)
%
% O programa implementa o método de Euler explícito de ordem 1
% p,q = condições iniciais
% h = passo de integração
% tmax = tempo limite
%
% matrizes constantes
J = [0 1;-1 0];
A = [-2 0;0 1];

% Funções Hamiltonianas
Hp = p + J*q;
Hq = J'*p + A*q + q/norm(q)^3;
f = [Hp;-Hq];

% algoritmo do método
tspan=0:h:tmax; % número de passos
NT = length(tspan);
neq = length(p);
P = zeros(neq,NT);
Q = zeros(neq,NT);
Y = zeros(2*neq,NT);
H = zeros(NT,1);
P(:,1)=p;
Q(:,1)=q;
Y(:,1)=[Q(:,1);P(:,1)];
H(1) = 1/2*norm(p)^2 - q'*J*q - q(1)^2 + 1/2*q(2)^2 - 1/norm(q);
for i = 1:NT-1
    Y(:,i+1) = Y(:,i) + h*f;
    Q(:,i+1) = Y(1:neq,i+1);
    P(:,i+1) = Y(neq+1:2*neq,i+1);

    % Cálculo das funções Hamiltonianas
    q = Q(:,i+1);
    p = P(:,i+1);
    Hp = p + J*q;
    Hq = J'*p + A*q + q/norm(q)^3;
```

```

    f=[Hp;-Hq];
    H(i+1) = 1/2*norm(p)^2 - q'*J*q - q(1)^2 + 1/2*q(2)^2 - 1/norm(q);
end
for k=1:length(H)-1
    E(k) = H(k+1)-H(k);
end

% faz um plot das curvas com C constante e velocidade zero, para obter um plot
% de uma curva de Hill
[x,y] = meshgrid(-10:.05:10, -10:.05:10);

% C=2*U, U=potencial, V=0; V^2=2*U-C
C=3*x.^2+2./sqrt(x.^2+y.^2);

Cq = 3*q(1)^2+2/sqrt(q(1)^2+q(2)^2);
V=[Cq Cq];

% figuras
contour(x,y,C,V,'k');
hold on
plot(Q(1,:),Q(2,:))

```

A.2 Método de Euler implícito

```

function [P,Q,E] = hill_euler_implicito(p,q,h,tmax)
%
% O programa implementa o método de Euler implícito de ordem 1
% p,q = condições iniciais
% h = passo de integração
% tmax = tempo limite
%
% matrizes constantes
J = [0 1;-1 0];

% algoritmo do método de Euler implícito
tspan=0:h:tmax; % número de passos
NT = length(tspan);
neq = length(p);
P = zeros(neq,NT);
Q = zeros(neq,NT);
H = zeros(NT,1);
P(:,1)=p;
Q(:,1)=q;
Y = zeros(2*neq,NT);
Y(:,1) = [ Q(:,1); P(:,1)];
yold = Y(:,1);
H(1) = 1/2*norm(p)^2 - q'*J*q - q(1)^2 + 1/2*q(2)^2 - 1/norm(q);
for i = 1:NT-1
    Y(:,i+1) = hill_newton(Y(:,i),h);
    Q(:,i+1) = Y(1:neq,i+1);
    P(:,i+1) = Y(neq+1:2*neq,i+1);

    % Cálculo da Hamiltoniana
    H(i+1) = 1/2*norm(P(:,i+1))^2 - Q(:,i+1)'*J*P(:,i+1) - Q(1,i+1)^2 + ...
            1/2*Q(2,i+1)^2 - 1/norm(Q(:,i+1));
end
for k=1:length(H)-1
    E(k) = H(k+1)-H(k);
end

% faz um plot das curvas com C constante e velocidade zero, para obter um plot
% de uma curva de Hill
[x,y] = meshgrid(-10:.05:10, -10:.05:10);

% C=2*U, U=potencial, V=0; V^2=2*U-C
C=3*x.^2+2./sqrt(x.^2+y.^2);

Cq = 3*0.45^2+2/sqrt(0.45^2+0.05^2);

```

```

V=[Cq Cq];

% figuras
contour(x,y,C,V,'k');
hold on
plot(Q(1,:),Q(2,:))

function x = hill_newton(x0,h)
% Método de Newton para sistemas de equações não lineares para o problema de Hill,
% no método de Euler implícito

xeps = 5*eps;
feps = 5*eps;    % tolerância é 5*eps
maxit = 20;
q=x0(1:2); p=x0(3:4);

x = x0; k = 0;    % palpite inicial e número corrente de iterações
while k <= maxit
    k = k + 1;
    q = x(1:2);
    p = x(3:4);
    f1 = [ q(1)-x0(1)-h*(p(1)+q(2)); q(2)-x0(2)-h*(p(2)-q(1)) ];
    f2 = [ p(1)-x0(3)-h*(p(2)+2*q(1)-q(1)/(q(1)^2+q(2)^2)^(3/2));
           p(2)-x0(4)-h*(-p(1)-q(2)-q(2)/(q(1)^2+q(2)^2)^(3/2)) ];
    %
    G1 = [ 1, -h, -h, 0 ];
    G2 = [ h, 1, 0, -h ];
    G3 = [ h*(-2+1/(q(1)^2+q(2)^2)^(3/2))-3*q(1)^2/(q(1)^2+q(2)^2)^(5/2),
           -3*h*q(1)/(q(1)^2+q(2)^2)^(5/2)*q(2), 1, -h ];
    G4 = [ -3*h*q(1)/(q(1)^2+q(2)^2)^(5/2)*q(2),
           h*(1+1/(q(1)^2+q(2)^2)^(3/2))-3*q(2)^2/(q(1)^2+q(2)^2)^(5/2), h, 1 ];
    %
    f = [ f1; f2 ];    % vector f
    G = [ G1;G2;G3;G4 ];    % Jacobiana G
    dx = G\f;    % resolve a equação linear
    x = x - dx;
    if ( norm(f) < feps ) | ( norm(dx) < xeps ), return; end
end
warning(sprintf('Solução não encontrada dentro da tolerância após %d iterações\n',k));

```

A.3 Regra do ponto médio implícita

```

function [P,Q,E] = hill_pontomedio(p,q,h,tmax);
%
% O programa implementa a regra do ponto médio implícita de ordem 2
% p,q = condições iniciais
% h = passo de integração
% tmax = tempo limite
%
tspan=0:h:tmax;    % número de passos
NT = length(tspan);
neq = length(p);
P = zeros(neq,NT);
Q = zeros(neq,NT);
H = zeros(NT,1);
P(:,1)=p; Q(:,1)=q;
Y = zeros(2*neq,NT);
Y(:,1) = [ Q(:,1); P(:,1)];
yold = Y(:,1);
H(1) = 1/2*norm(P(:,1))^2 - Q(:,1)'*J*P(:,1) - Q(1,1)^2 + ...
       1/2*Q(2,1)^2 - 1/norm(Q(:,1));
for i = 1:NT-1
    Y(:,i+1) = newton_pontomedio(Y(:,i),h);
    Q(:,i+1) = Y(1:neq,i+1);
    P(:,i+1) = Y(neq+1:2*neq,i+1);

    % Cálculo da Hamiltoniana
    H(i+1) = 1/2*norm(P(:,i+1))^2 - Q(:,i+1)'*J*P(:,i+1) - Q(1,i+1)^2 + ...

```

```

                1/2*Q(2,i+1)^2 - 1/norm(Q(:,i+1));
end
for k=1:length(H)-1
    E(k) = H(k+1)-H(k);
end

% faz um plot das curvas com C constante e velocidade zero, para obter um plot
% de uma curva de Hill
[x,y] = meshgrid(-10:.05:10, -10:.05:10);

% C=2*U, U=potencial, V=0; V^2=2*U-C
C=3*x.^2+2./sqrt(x.^2+y.^2);

Cq = 3*0.45^2+2/sqrt(0.45^2+0.05^2);
V=[Cq Cq];

% figuras
contour(x,y,C,V,'k');
hold on
plot(Q(1,:),Q(2,:))
xlabel('q_1')
ylabel('q_2')

figure
plot(E,'.')
xlabel('Tempo')
ylabel('Erro na Hamiltoniana')

figure
plot(H,'.')
xlabel('Tempo')
ylabel('Hamiltoniana')

function x = newton_pontomedio(x0,h)
% Método de newton para sistemas de equações não lineares,
% no problema de Hill, com a regra do ponto médio

xepts = 5*eps;
fepts = 5*eps;    % tolerância é 5*eps
maxit = 20;
q=x0(1:2); p=x0(3:4);

q0 = x0(1:2);
p0 = x0(3:4);

x = x0; k = 0;    % Palpite inicial e número corrente de iterações

while k <= maxit
    k = k + 1;
    q = x(1:2);
    p = x(3:4);
    %
    f1 = [ q(1)-q0(1)-h*(1/2*p(1)+1/2*p0(1)+1/2*q(2)+1/2*q0(2)) ];
    f2 = [ q(2)-q0(2)-h*(1/2*p(2)+1/2*p0(2)-1/2*q(1)-1/2*q0(1)) ];
    f3 = [ p(1)-p0(1)-h*(1/2*p(2)+1/2*p0(2)+q(1)+q0(1)-...
            (4*q(1)+4*q0(1))/((q(1)+q0(1))^2+(q(2)+q0(2))^2)^(3/2)) ];
    f4 = [ p(2)-p0(2)-h*(-1/2*p(1)-1/2*p0(1)-1/2*q(2)-1/2*q0(2)-...
            (4*q(2)+4*q0(2))/((q(1)+q0(1))^2+(q(2)+q0(2))^2)^(3/2)) ];
    f = [ f1; f2; f3; f4 ];    % vector f
    %
    G11 = 1;
    G12 = -1/2*h;
    G13 = -1/2*h;
    G14 = 0;
    G21 = 1/2*h;
    G22 = 1;
    G23 = 0;
    G24 = -1/2*h;
    G31 = -h*(1-4/((q(1)+q0(1))^2+(q(2)+q0(2))^2)^(3/2)+3/2*(4*q(1)+4*q0(1))/((q(1)+q0(1))^2+...
            (q(2)+q0(2))^2)^(5/2)*(2*q(1)+2*q0(1)));
    G32 = -3/2*h*(4*q(1)+4*q0(1))/((q(1)+q0(1))^2+(q(2)+q0(2))^2)^(5/2)*(2*q(2)+2*q0(2));
    G33 = 1;
    G34 = -1/2*h;

```

```

G41 = -3/2*h*(4*q(2)+4*q0(2))/((q(1)+q0(1))^2+(q(2)+q0(2))^2)^(5/2)*(2*q(1)+2*q0(1));
G42 = -h*(-1/2-4/((q(1)+q0(1))^2+(q(2)+q0(2))^2)^(3/2)+3/2*(4*q(2)+4*q0(2))/((q(1)+q0(1))^2...
      +(q(2)+q0(2))^2)^(5/2)*(2*q(2)+2*q0(2)));
G43 = 1/2*h;
G44 = 1;
G = [ G11 G12 G13 G14; G21 G22 G23 G24; G31 G32 G33 G34; G41 G42 G43 G44 ]; % Jacobiana G
%
dx = G\f; % resolve a equação linear
x = x - dx;
if ( norm(f) < feps ) | ( norm(dx) < xeps ), return; end
end
warning(sprintf('Solução não encontrada dentro da tolerância após %d iterações\n',k));

```

A.4 Método Runge-Kutta de ordem 4

```

function [P,Q,E,H]=hill_rk(p,q,h,tmax);
%
% O programa implementa o método Runge-Kutta de ordem 4
% p,q = condições iniciais
% h = passo de integração
% tmax = tempo limite
%
% matriz constante
J = [0 1;-1 0];

% algoritmo rk45
tspan=0:h:tmax; % número de passos
NT = length(tspan);
neq = length(p);
P = zeros(neq,NT);
Q = zeros(neq,NT);
Y = zeros(2*neq,NT);
H = zeros(NT,1);
P(:,1)=p; Q(:,1)=q;
Y(:,1)=[Q(:,1);P(:,1)];
H(1) = 1/2*norm(P(:,1))^2 - Q(:,1)'*J*P(:,1) - Q(1,1)^2 + 1/2*Q(2,1)^2 - 1/norm(Q(:,1));
for i = 1:NT-1
    k1 = h*f(Y(:,i),neq);
    k2 = h*f(Y(:,i)+0.5*k1,neq);
    k3 = h*f(Y(:,i)+0.5*k2,neq);
    k4 = h*f(Y(:,i)+k3,neq);
    Y(:,i+1) = Y(:,i) + (k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4)/6;
    Q(:,i+1) = Y(1:neq,i+1);
    P(:,i+1) = Y(neq+1:2*neq,i+1);
    H(i+1) = 1/2*norm(P(:,i+1))^2 - Q(:,i+1)'*J*P(:,i+1) - Q(1,i+1)^2 + ...
            1/2*Q(2,i+1)^2 - 1/norm(Q(:,i+1));
end
for k=1:length(H)-1
    E(k) = H(k+1)-H(k);
end

% faz um plot das curvas com C constante e velocidade zero,
% para obter um plot de uma curva de Hill
[x,y] = meshgrid(-10:.05:10, -10:.05:10);

% C=2*U, U=potencial, V=0; V^2=2*U-C
C=3*x.^2+2./sqrt(x.^2+y.^2);

Cq = 3*q(1)^2+2/sqrt(q(1)^2+q(2)^2);
V=[Cq Cq];

% figuras
contour(x,y,C,V,'k');
hold on
plot(Q(1,:),Q(2,:))
xlabel('q_1')
ylabel('q_2')

```

```
function G = f(y,neq)
% matrizes constantes
J = [0 1;-1 0];
A = [-2 0;0 1];
% função Hamiltoniana
q = y(1:neq);
p = y(neq+1:2*neq);
G1 = p + J*q;
G2 = J'*p + A*q + q/norm(q)^3;
G=[G1;-G2];
```

A.5 Método de Euler simpléctico

```
function [P,Q,E,H]=hill_euler_simplectico(p,q,h,tmax);
%
% 0 programa implementa o método de Euler simpléctico de ordem 1
% p,q = condições iniciais
% h = passo de integração
% tmax = tempo limite
%
% matrizes constantes
J = [0 1;-1 0];
A = [-2 0;0 1];
I = eye(2);

% algoritmo para o método de Euler simpléctico
tspan=0:h:tmax; % número de passos
NT = length(tspan);
neq = length(p);
P = zeros(neq,NT);
Q = zeros(neq,NT);
H = zeros(NT,1);
L = [1 h; -h 1];
P(:,1)=p; Q(:,1)=q;
H(1) = 1/2*norm(P(:,1))^2 - Q(:,1)'*J*P(:,1) - Q(1,1)^2 + 1/2*Q(2,1)^2 - 1/norm(Q(:,1));
for i = 1:NT-1
    P(:,i+1) = 1/(1+h^2)*L * ( P(:,i) - h * (A*Q(:,i) + Q(:,i)/norm(Q(:,i))^3) );
    Q(:,i+1) = Q(:,i) + h * (P(:,i+1) + J*Q(:,i));

    % cálculo da Hamiltoniana
    H(i+1) = 1/2*norm(P(:,i+1))^2 - Q(:,i+1)'*J*P(:,i+1) - Q(1,i+1)^2 + ...
            1/2*Q(2,i+1)^2 - 1/norm(Q(:,i+1));
end
for k=1:length(H)-1
    E(k) = H(k+1)-H(k);
end

% faz um plot das curvas com C constante e velocidade zero,
% para obter um plot de uma curva de Hill
[x,y] = meshgrid(-10:.05:10, -10:.05:10);

% C=2*U, U=potencial, V=0; V^2=2*U-C
C=3*x.^2+2./sqrt(x.^2+y.^2);

Cq = 3*q(1)^2+2./sqrt(q(1)^2+q(2)^2);
V=[Cq Cq];
contour(x,y,C,V,'k');

% figuras
hold on
plot(Q(1,:),Q(2,:))
xlabel('q_1')
ylabel('q_2')

figure
plot(E,'.')
```

A.6 Método Störmer-Verlet

```

function [P,Q,E,H]=hill_stormer(p,q,h,tmax);
%
% 0 programa implementa o método Stormer-Verlet de ordem 2
% p,q = condições iniciais
% h = passo de integração
% tmax = tempo limite
%
% matrizes constantes
J = [0 1;-1 0];
A = [-2 0;0 1];
I = eye(2);

% algoritmo do método Stormer-Verlet
tspan=0:h:tmax; % número de passos
NT = length(tspan);
neq = length(p);
P = zeros(neq,NT);
Q = zeros(neq,NT);
H = zeros(NT,1);
L = [2 h; -h 2];
P(:,1)=p; Q(:,1)=q;
H(1) = 1/2*norm(P(:,1))^2 - Q(:,1)'*J*P(:,1) - Q(1,1)^2 + 1/2*Q(2,1)^2 - 1/norm(Q(:,1));
for i = 1:NT-1
    Ph = 2/(4+h^2)*L * ( P(:,i) - h/2 * (A*Q(:,i) + Q(:,i)/norm(Q(:,i))^3) );
    Q(:,i+1) = 2/(4+h^2)*L * ( (I+h/2*J)*Q(:,i) + h*Ph );
    P(:,i+1) = (I-h/2*J)*Ph - h/2*(A*Q(:,i+1) + Q(:,i+1)/norm(Q(:,i+1))^3);

    % cálculo da Hamiltoniana
    H(i+1) = 1/2*norm(P(:,i+1))^2 - Q(:,i+1)'*J*P(:,i+1) - Q(1,i+1)^2 + ...
            1/2*Q(2,i+1)^2 - 1/norm(Q(:,i+1));
end
for k=1:length(H)-1
    E(k) = H(k+1)-H(k);
end

% faz um plot das curvas com C constante e velocidade zero,
% para obter um plot de uma curva de Hill
[x,y] = meshgrid(-10:.05:10, -10:.05:10);

% C=2*U, U=potencial, V=0; V^2=2*U-C
C=3*x.^2+2./sqrt(x.^2+y.^2);

Cq = 3*q(1)^2+2./sqrt(q(1)^2+q(2)^2);
V=[Cq Cq];

% figuras
contour(x,y,C,V,'k');
hold on
plot(Q(1,:),Q(2,:))
xlabel('q_1')
ylabel('q_2')

figure
plot(E,'.')
xlabel('Tempo')
ylabel('Erro na Hamiltoniana')

figure
plot(H,'.')
xlabel('Tempo')
ylabel('Hamiltoniana')

```

A.7 Método de Euler simpléctico adaptativo

```

function [P,Q,E,H]=hill_eulersimp_adaptativo(p,q,tmax);

```

```

%
% O programa implementa o método de Euler simpléctico com passo de integração variável
% p,q = condições iniciais
% tmax = tempo limite
%
% matrizes constantes
J = [0 1;-1 0];
A = [-2 0;0 1];
I = eye(2);

% algoritmo do método de Euler simpléctico adaptativo
neq = length(p);
P = zeros(neq, []);
Q = zeros(neq, []);
H = zeros([], 1);
K = zeros([], 1);
P(:,1)=p; Q(:,1)=q;
i=1; r=1; ep=0.001; t=0; h=[];
s = (q'*q)^r;
H(1) = 1/2*norm(P(:,1))^2 - Q(:,1)'*J*P(:,1) + 1/2*Q(:,1)'*A*Q(:,1) - 1/norm(Q(:,1));
K(1) = s*(H(1)-H(1));
while t <= tmax
    p = P(:,i); q = Q(:,i);
    s = (q'*q)^r;
    sq = 2*r*(q'*q)^(r-1)*q;
    h(i) = ep*s;
    t = t + h(i);
    R = inv(I+ep*s*J'+ep*sq*q'*J');
    if r == 0
        P(:,i+1) = R * (P(:,i)-ep*s*(A*Q(:,i)+Q(:,i)/norm(Q(:,i))^3));
    else
        v = A*q + q/norm(q)^3;
        d = 1/2*q'*A*q-1/norm(q)-H(1);
        a = -(-1/2*R(1,1)*ep*sq(1)-1/2*R(1,2)*ep*sq(2))^2-...
            (-1/2*R(2,1)*ep*sq(1)-1/2*R(2,2)*ep*sq(2))^2;
        b = -2*(R(1,1)*(p(1)-ep*s*v(1)-d*ep*sq(1))+R(1,2)*(p(2)-...
            ep*s*v(2)-d*ep*sq(2)))*(-1/2*R(1,1)*ep*sq(1)-...
            1/2*R(1,2)*ep*sq(2))+1-2*(R(2,1)*(p(1)-ep*s*v(1)-d*ep*sq(1))+...
            R(2,2)*(p(2)-ep*s*v(2)-d*ep*sq(2)))*(-1/2*R(2,1)*ep*sq(1)-1/2*R(2,2)*ep*sq(2));
        c = -(R(2,1)*(p(1)-ep*s*v(1)-d*ep*sq(1))+R(2,2)*(p(2)-ep*s*v(2)-d*ep*sq(2)))^2-...
            (R(1,1)*(p(1)-ep*s*v(1)-d*ep*sq(1))+R(1,2)*(p(2)-ep*s*v(2)-d*ep*sq(2)))^2;
        % resolve a equação quadrática para beta
        beta_vector = [(-b + sqrt(b^2-4*a*c))/(2*a); (-b - sqrt(b^2-4*a*c))/(2*a)];
        err1 = abs(P(:,i)'+P(:,i)-beta_vector(1));
        err2 = abs(P(:,i)'+P(:,i)-beta_vector(2));
        if err1 < err2
            beta = beta_vector(1);
        else
            beta = beta_vector(2);
        end
        P(:,i+1) = R * (P(:,i)-ep*s*(A*Q(:,i)+Q(:,i)/norm(Q(:,i))^3)-...
            ep*sq*(1/2*beta+1/2*Q(:,i)'+A*Q(:,i)-1/norm(Q(:,i))-H(1)));
    end
    Q(:,i+1) = Q(:,i) + ep*s*(P(:,i+1)+J*Q(:,i));

    % cálculo da Hamiltoniana
    H(i+1) = 1/2*norm(P(:,i+1))^2 - Q(:,i+1)'*J*P(:,i+1) - Q(1,i+1)^2 +...
        1/2*Q(2,i+1)^2 - 1/norm(Q(:,i+1));
    K(i+1) = s*(H(i+1)-H(1));
    i = i+1;
end
for k=1:length(H)-1
    E(k) = H(k+1)-H(k);
end

% faz um plot das curvas com C constante e velocidade zero,
% para obter um plot de uma curva de Hill
[x,y] = meshgrid(-10:.05:10, -10:.05:10);

% C=2*U, U=potencial, V=0; V^2=2*U-C
C=3*x.^2+2./sqrt(x.^2+y.^2);

Cq = 3*Q(1,1)^2+2/sqrt(Q(1,1)^2+Q(2,1)^2);

```

```

V=[Cq Cq];

% figuras
contour(x,y,C,V,'k');
hold on
plot(Q(1,:),Q(2,:))
xlabel('q_1')
ylabel('q_2')

figure
plot(E,'.')
xlabel('Tempo')
ylabel('Erro na Hamiltoniana')

figure
plot(H,'.')
xlabel('Tempo')
ylabel('Hamiltoniana')

```

A.8 Método Störmer-Verlet adaptativo

```

function [P,Q,E,H]=hill_stormer_adaptativo(p,q,tmax);
%
% O programa implementa o método Stormer-Verlet com passo de integração variável
% p,q = condições iniciais
% tmax = tempo limite
%
% matrizes constantes
J = [0 1;-1 0];
A = [-2 0;0 1];
I = eye(2);

% algoritmo do método Stormer-Verlet adaptativo
neq = length(p);
P = zeros(neq, []);
Q = zeros(neq, []);
H = zeros([], 1);
K = zeros([], 1);
P(:,1)=p; Q(:,1)=q;
i=1; r=1; ep=0.01; t=0; h=[];
s = (q'*q)^r;
sq = 2*r*(q'*q)^(r-1)*q;
H(1) = 1/2*norm(P(:,1))^2 - Q(:,1)'*J*P(:,1) + 1/2*Q(:,1)'*A*Q(:,1) - 1/norm(Q(:,1));
K(1) = s*(H(1)-H(1));
while t <= tmax
    R = inv(I+ep/2*s*J'+ep/2*sq*q'*J');
    if r == 0
        Ph = R * (P(:,i)-ep/2*s*(A*Q(:,i)+Q(:,i)/norm(Q(:,i))^3));
    else
        v = A*q + q/norm(q)^3;
        d = 1/2*q'*A*q-1/norm(q)-H(1);
        a = -(-1/2*R(1,1)*ep/2*sq(1)-1/2*R(2,2)*ep/2*sq(2))^2-...
            (-1/2*R(2,1)*ep/2*sq(1)-1/2*R(2,2)*ep/2*sq(2))^2;
        b = -2*(R(1,1)*(p(1)-ep/2*s*v(1)-d*ep/2*sq(1))+R(1,2)*(p(2)-...
            ep/2*s*v(2)-d*ep/2*sq(2)))*(-1/2*R(1,1)*ep/2*sq(1)...
            -1/2*R(1,2)*ep/2*sq(2))+1-2*(R(2,1)*(p(1)-ep/2*s*v(1)-d*ep/2*sq(1))+...
            R(2,2)*(p(2)-ep/2*s*v(2)-d*ep/2*sq(2)))*(-1/2*R(2,1)*ep/2*sq(1)-1/2*R(2,2)*ep/2*sq(2));
        c = -(R(2,1)*(p(1)-ep/2*s*v(1)-d*ep/2*sq(1))+R(2,2)*(p(2)-ep/2*s*v(2)-d*ep/2*sq(2)))^2-...
            -(R(1,1)*(p(1)-ep/2*s*v(1)-d*ep/2*sq(1))+R(1,2)*(p(2)-ep/2*s*v(2)-d*ep/2*sq(2)))^2;
        beta_vector = [(-b + sqrt(b^2-4*a*c))/(2*a); (-b - sqrt(b^2-4*a*c))/(2*a)];
        err1 = abs(P(:,i)'*P(:,i)-beta_vector(1));
        err2 = abs(P(:,i)'*P(:,i)-beta_vector(2));
        if err1 < err2
            beta= beta_vector(1);
        else
            beta = beta_vector(2);
        end
        end
        Ph = R * (P(:,i)-ep/2*s*(A*Q(:,i)+Q(:,i)/norm(Q(:,i))^3)-...

```

```

        ep/2*sq*(1/2*beta+1/2*Q(:,i)')*A*Q(:,i)-1/norm(Q(:,i))-H(1));
    end
    y0 = [Q(:,i);Ph];
    alpha = newton_stormer(y0,J,I,ep,s,r);
    Q(:,i+1) = inv(I-ep/2*alpha*J)*(Q(:,i)+ep/2*(s+alpha)*Ph+ep/2*s*J*Q(:,i));
    sq = 2*r*(Q(:,i+1)')*Q(:,i+1)^(r-1)*Q(:,i+1);
    P(:,i+1) = Ph - ep/2*alpha*(J'*Ph+A*Q(:,i+1)+Q(:,i+1)/norm(Q(:,i+1))^3)...
        -ep/2*sq*(1/2*Ph'*Ph-Q(:,i+1)')*J*Ph+1/2*Q(:,i+1)')*A*Q(:,i+1)-1/norm(Q(:,i+1))-H(1));
    h(i+1) = ep*(s+alpha)/2;
    t = t + h(i+1);
    p = P(:,i+1);
    q = Q(:,i+1);
    s = alpha;
    % cálculo da Hamiltoniana
    H(i+1) = 1/2*norm(P(:,i+1))^2 - Q(:,i+1)')*J*P(:,i+1) - Q(1,i+1)^2 +...
        1/2*Q(2,i+1)^2 - 1/norm(Q(:,i+1));
    K(i+1) = s*(H(i+1)-H(1));
    i = i+1;
end

for k=1:length(H)-1
    E(k) = H(k+1)-H(k);
end

% faz um plot das curvas com C constante e velocidade zero,
% para obter um plot de uma curva de Hill
[x,y] = meshgrid(-10:.05:10, -10:.05:10);

% C=2*U, U=potencial, V=0; V^2=2*U-C
C=3*x.^2+2./sqrt(x.^2+y.^2);

Cq = 3*Q(1,1)^2+2./sqrt(Q(1,1)^2+Q(2,1)^2);
V=[Cq Cq];

% figuras
contour(x,y,C,V,'k');
hold on
plot(Q(1,:),Q(2,:))
xlabel('q_1')
ylabel('q_2')

figure
plot(E,'.')
xlabel('Tempo')
ylabel('Erro na Hamiltoniana')

figure
plot(H,'.')
xlabel('Tempo')
ylabel('Hamiltoniana')

function alpha = newton_stormer(x0,J,I,ep,s,r)
% Método de Newton para sistemas de equações não lineares,
% para o problema de Hill, com o método Stormer-Verlet adaptativo

xeps = 5*eps; feps = 5*eps; % tolerância é 5*eps
maxit = 20;
q=x0(1:2); Ph=x0(3:4);
q1=q(1); q2=q(2); Ph1=Ph(1); Ph2=Ph(2);
k = 0; % palpite inicial e número corrente de iterações
alpha = (q'*q)^r;

while k <= maxit
    k = k + 1;
    g = inv(I-ep/2*alpha*J)*(q+ep/2*(s+alpha)*Ph+ep/2*s*J*q);
    f = alpha - (g'*g)^r;
    %
    df = 1-((4/(4+ep^2*alpha^2)*(q1+1/2*ep*(s+alpha)*Ph1+1/2*ep*s*q2)...
        +2*ep*alpha/(4+ep^2*alpha^2)*(q2+1/2*ep*(s+alpha)*Ph2-1/2*ep*s*q1))^2+...
        (-2*ep*alpha/(4+ep^2*alpha^2)*(q1+1/2*ep*(s+alpha)*Ph1+1/2*ep*s*q2)+...
        4/(4+ep^2*alpha^2)*(q2+1/2*ep*(s+alpha)*Ph2-1/2*ep*s*q1))^2)^r*...
        r*(2*(4/(4+ep^2*alpha^2)*(q1+1/2*ep*(s+alpha)*Ph1+1/2*ep*s*q2)+...
        2*ep*alpha/(4+ep^2*alpha^2)*(q2+1/2*ep*(s+alpha)*Ph2-1/2*ep*s*q1))*...

```

```

(-8/(4+ep^2*alpha^2)^2*(q1+1/2*ep*(s+alpha)*Ph1+1/2*ep*s*q2)*ep^2*alpha+...
2/(4+ep^2*alpha^2)*ep*Ph1+2*ep/(4+ep^2*alpha^2)*(q2+1/2*ep*(s+alpha)*Ph2-...
1/2*ep*s*q1)-4*ep^3*alpha^2/(4+ep^2*alpha^2)^2*(q2+1/2*ep*(s+alpha)*Ph2-...
1/2*ep*s*q1)+ep^2*alpha/(4+ep^2*alpha^2)*Ph2)+2*(-2*ep*alpha/(4+ep^2*alpha^2)*...
(q1+1/2*ep*(s+alpha)*Ph1+1/2*ep*s*q2)+4/(4+ep^2*alpha^2)*(q2+1/2*ep*(s+alpha)*...
Ph2-1/2*ep*s*q1))*(-2*ep/(4+ep^2*alpha^2)*(q1+1/2*ep*(s+alpha)*Ph1+1/2*ep*s*q2)+...
4*ep^3*alpha^2/(4+ep^2*alpha^2)^2*(q1+1/2*ep*(s+alpha)*Ph1+1/2*ep*s*q2)-...
ep^2*alpha/(4+ep^2*alpha^2)*Ph1-8/(4+ep^2*alpha^2)^2*(q2+1/2*ep*(s+alpha)*Ph2-...
1/2*ep*s*q1)*ep^2*alpha+2/(4+ep^2*alpha^2)*ep*Ph2))/((4/(4+ep^2*alpha^2)*...
(q1+1/2*ep*(s+alpha)*Ph1+1/2*ep*s*q2)+2*ep*alpha/(4+ep^2*alpha^2)*...
(q2+1/2*ep*(s+alpha)*Ph2-1/2*ep*s*q1))^2+(-2*ep*alpha/(4+ep^2*alpha^2)*...
(q1+1/2*ep*(s+alpha)*Ph1+1/2*ep*s*q2)+4/(4+ep^2*alpha^2)*...
(q2+1/2*ep*(s+alpha)*Ph2-1/2*ep*s*q1))^2);
%
dx = f/df; % resolve a equação linear
alpha = alpha - dx;
if ( norm(f) < feps ) | ( norm(dx) < xeps ), return; end
end
warning(sprintf('Solução não encontrada dentro da tolerância após %d iterações\n',k));

```

Apêndice B

Método de Newton

O método de Newton permite encontrar a solução da equação escalar $f(x) = 0$:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f(x^k)}{f_x(x^k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad x^0 \text{ dado.}$$

Tal pode ser reescrito como

$$f_x(x^k)(x^{k+1} - x^k) = -f_x(x^k),$$

ou

$$f_x(x^k)\Delta x^k = -f_x(x^k),$$

onde $\Delta x^k \equiv x^{k+1} - x^k$, tal que

$$x^{k+1} = x^k + \Delta x^k.$$

Esta última formulação também pode ser usada para um sistema de equações: resolver $G(u) = 0$ pelo método de Newton assume a forma

$$\begin{aligned} G_u(u^k)(u^{k+1} - u^k) &= -G_u(u^k), \\ u^{k+1} &= u^k + \Delta u^k. \end{aligned}$$

A matriz jacobiana $G_u(\cdot)$ é uma matriz quadrada.

Bibliografia

- [1] V. I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer-Verlag, Second edition, 1989.
- [2] U. Ascher and S. Reich. The midpoint scheme and variants for hamiltonian systems: advantages and pitfalls. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(3):1045–1065, 1999.
- [3] V. Barger and M. Olsson. *Classic Mechanics: A Modern Perspective*. McGraw-Hill, 1995.
- [4] J. Barrow-Green. *Poincaré and the Three Body Problem*, volume 11 of *History of Mathematics*. London Mathematical Society, 1997.
- [5] C. Budd, B. Leimkuhler, and M. Piggott. Scaling invariance and adaptivity. *Appl. Numer. Math.*, 39:261–288, 2001.
- [6] C. Budd and M. D. Piggott. Geometric integration and its applications. In *Handbook of numerical analysis*, volume XI, pages 35–139. North-Holland, 2003.
- [7] J. Cartwright and O. Piro. The dynamics of Runge-Kutta methods. *Int. J. Bifurcation and Chaos*, 2(3):427–449, 1992.
- [8] Z. Ge and J. E. Marsden. Lie-Poisson Hamilton-Jacobi theory and Lie-Poisson integrators. *Phys. Lett. A*, 133:134–139, 1988.
- [9] B. Gladman, M. Duncan, and J. Candy. Symplectic integrators for long-term integrations in celestial mechanics. *Celestial Mechanics. Dynamical Astronomy*, 52:221–240, 1991.
- [10] E. Hairer. Variable time step integration with symplectic methods. *Applied Numerical Mathematics*, 25:219–227, 1997.
- [11] E. Hairer. Important aspects of geometric numerical integration. *Journal of Scientific Computing*, 25(1):67–81, October 2005.
- [12] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. Geometric numerical integration illustrated by the Störmer-Verlet method. *Acta Numerica*, pages 1–51, 2003.

- [13] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. *Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms For Ordinary Differential Equations*. Springer Series in Computational Mathematics. Springer, Second edition, 2006.
- [14] E. Hairer, S.P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I*. Springer Series in Computational Mathematics. Springer, Second edition, 2000.
- [15] Douglas P. Hamilton and Joseph A. Burns. Orbital Stability Zones about Asteroids. *Icarus*, (92):118–131, 1991.
- [16] Louis N. Hand and Janet D. Finch. *Analytical Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [17] A. Iserles. *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [18] C. Kane, J. E. Marsden, and M. Ortiz. Symplectic-energy-momentum preserving variational integrators. *Journal of Mathematical Physics*, 40(7):3353–3371, 1999.
- [19] C. Kane, J. E. Marsden, M. Ortiz, and M. West. Variational integrators and the Newmark algorithm for conservative and dissipative mechanical systems. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 49:1295–1325, 2000.
- [20] T. Kibble and F. Berkshire. *Classic Mechanics*. Addison Wesley Longman, 1996.
- [21] L. Kong, R. Liu, and X. Zheng. A survey on symplectic and multi-symplectic algorithms. *Applied Mathematics and Computation*, 186:670–684, 2007.
- [22] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Mechanics (Course of Theoretical Physics)*, volume 1. Butterworth-Heinemann Ltd, Third edition, 1976.
- [23] B. Leimkuhler and S. Reich. *Simulating Hamiltonian Dynamics*, volume 14 of *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics*. Cambridge University Press, 2004.
- [24] A. Lew, J. E. Marsden, M. Ortiz, and M. West. An overview of variational integrators. In L. P. Franca, T. E. Tezduyar, and A. Masud, editors, *Finite Element Methods: 1970's and beyond*, pages 98–115. CIMNE, Barcelona, 2003.
- [25] A. Lew, J. E. Marsden, M. Ortiz, and M. West. Variational time integrators. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 60:153–212, 2004.
- [26] R. S. MacKay. Some aspects of the dynamics and numerics of Hamiltonian systems. In D.S. Broomhead and A. Iserles, editors, *The Dynamics of Numerics and the Numerics*

- of Dynamics*, volume 34 of *The IMA Conference Series*, pages 137–193. Clarendon Press, Oxford, 1992.
- [27] J. Marsden and S. Ross. New methods in celestial mechanics and mission design. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 43(1):43–73, 2005.
- [28] J. E. Marsden and T. S. Ratiu. *Introduction to Mechanics and Symmetry*. Texts in Applied Mathematics 17. Springer-Verlag, New York, Second edition, 1999.
- [29] J. E. Marsden and M. West. Discrete mechanics and variational integrators. *Acta Numerica*, 10:357–514, 2001.
- [30] R. McLachlan and R. Quispel. Six Lectures on the Geometric Integration of ODE’s. In R. Devone, A. Iserles, and E. Süli, editors, *Foundations of Computational Mathematics*, pages 155–210. Cambridge University Press, 2001.
- [31] R. I. McLachlan and P. Atela. The accuracy of symplectic integrators. *Nonlinearity*, 5(2):541–562, 1992.
- [32] R. I. McLachlan and R. Quispel. Geometric Integrators for ODE’s. *J. Phys. A*, 39(19):5251–5286, 2006.
- [33] R. I. McLachlan and C. Scovel. A survey of open problems in symplectic integration. *Fields Inst. Communications*, 10:151–180, 1996.
- [34] E. Meletlidou, S. Ichtiaroglou, and F. J. Winterberg. Non integrability of Hill’s lunar problem. *Celestial Mechanics. Dynamical Astronomy*, 80(2):145–156, 2001.
- [35] K. Meyer. Periodic solutions of the n-body problem. *Journal of Differential Equations*, (39):2–38, 1981.
- [36] K. Meyer and D. Schmidt. From the restricted to the full three-body problem. *Transactions of the American Mathematical Society*, 352(5):2283–2299, 2000.
- [37] K. R. Meyer. *Periodic Solutions of the N-Body Problem*, volume 1719 of *Lectures Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, 1999.
- [38] T. S. Ratiu, R. Tudoran, L. Sbano, E. S. Dias, and G. Terra. A crash course in geometric mechanics. In J. Montaldi and T. Ratiu, editors, *Geometric Mechanics and Symmetry: the Peyresq Lectures*, London Mathematical Society Lecture Notes Series, pages 23–156. Cambridge University Press, 2005.
- [39] S. Reich. Backward error analysis for numerical integrators. *SIAM J. Num. Anal.*, 36:1549–1570, 1999.

- [40] S. T. Sadetov. On algebraic integrals of the Hill problem and restricted circular planar three-body problem on a level of energy. *Regular and chaotic dynamics*, 10(3), 2005.
- [41] J.M. Sanz-Serna and M.P. Calvo. *Numerical Hamiltonian Problems*. Chapman & Hall, London, 1994.
- [42] C. L. Siegel and J. K. Moser. *Lectures on Celestial Mechanics*. Springer-Verlag, 1971.
- [43] R. D. Skeel and C. W. Gear. Does variable step size ruin a symplectic integrator? *Physica D*, (60):311–313, 1992.
- [44] D. Stoffer. Variable steps for reversible integration methods. *Computing*, (55):1–22, 1995.
- [45] Victor Szebehely. *Theory of orbits*. Academic Press Inc., 1967.
- [46] H. Waalkens, A. Burbanks, and S. Wiggins. A computational procedure to detect a new type of high-dimensional chaotic saddle and its application to the 3D Hill’s problem. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 37:257–265, 2004.
- [47] J. Wendlandt and J. E. Marsden. Mechanical integrators derived from a discrete variational principle. *Physica D*, 106:223–246, 1997.