

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
BACHARELADO EM MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL

**Simulação numérica do problema de
N-corpos gravitacional**

Octavio Augusto Potalej

MONOGRAFIA FINAL

**MAP 2080 – TRABALHO DE
FORMATURA**

Supervisor: Profº Dr. Eduardo Colli

São Paulo
2024

Simulação numérica do problema de N-corpos gravitacional

Octavio Augusto Potalej

Esta versão da monografia contém
as correções e alterações sugeridas
pela Comissão Julgadora durante a
defesa da versão original do trabalho,
realizada em 13 de Dezembro de 2024.

Uma cópia da versão original está
disponível no Instituto de Matemática e
Estatística da Universidade de São Paulo.

Comissão julgadora:

Prof. Dr. Eduardo Colli (orientador) – IME-USP

Prof. Dr. Clodoaldo Grotta Ragazzo – IME-USP

Prof. Dr. Claudio Hirofume Asano – IME-USP

*O conteúdo deste trabalho é publicado sob a licença CC BY 4.0
(Creative Commons Attribution 4.0 International License)*

Ficha catalográfica elaborada com dados inseridos pelo(a) autor(a)

Biblioteca Carlos Benjamin de Lyra

Instituto de Matemática e Estatística

Universidade de São Paulo

Potalej, Octavio Augusto
Simulação numérica do problema de N-corpos gravitacional
/ Octavio Augusto Potalej; orientador, Eduardo Colli.
- São Paulo, 2024.
125 f.: il.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Matemática
Aplicada / Instituto de Matemática e Estatística /
Universidade de São Paulo.

Bibliografia

1. PROBLEMAS DE N-CORPOS. 2. EQUAÇÕES DIFERENCIAIS
ORDINÁRIAS. 3. ANÁLISE NUMÉRICA APLICADA. 4. MECÂNICA
HAMILTONIANA. I. Colli, Eduardo. II. Título.

Bibliotecárias do Serviço de Informação e Biblioteca
Carlos Benjamin de Lyra do IME-USP, responsáveis pela
estrutura de catalogação da publicação de acordo com a AACR2:
Maria Lúcia Ribeiro CRB-8/2766; Stela do Nascimento Madruga CRB 8/7534.

*“O sol já está brilhando, chegou o momento de
dar uma volta, então chega de matemática por
agora. Mas voltarei mais tarde aos diferentes
métodos, ocasionalmente, em detalhes...”*

Karl Marx, 1882

Agradecimentos

Ao meu orientador, com o qual sempre pude contar nos últimos anos, obrigado pelas conversas e reuniões, pelas ideias, pitacos e considerações. Encerro o curso satisfeito com o que foi e empolgado pelo que virá, e agradeço por seu imenso papel nisso. Obrigado, Prof. Colli.

À minha família, e em especial à minha mãe, que desde sempre me apoiou e esteve comigo, tantas vezes me aturou falando sobre matemática e também tornou tudo isso possível. Muito obrigado, mesmo.

Resumo

Octavio Augusto Potalej. **Simulação numérica do problema de N-corpos gravitacional**. Monografia (Bacharelado). Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2024.

A evolução de sistemas gravitacionais pode ser descrita através do Problema de N-Corpos Gravitacional (PNCG), cuja simulação numérica permite visualizar e testar propriedades qualitativas do Problema. As simulações são feitas através de integradores numéricos temporais, e estes existem em diversos tipos. Apresentamos métodos comuns, mas também métodos simpléticos, que possuem a propriedade de conservação da estrutura simplética do problema, apresentada em um capítulo dedicado à Mecânica Analítica, com foco na formulação Hamiltoniana. Tratamos também de um corretor numérico baseado em integrais primeiras, e formas de lidar com colisões e quase-colisões de corpos, usando choques elásticos e um amortecimento no potencial. Um simulador de PNCG em Fortran foi desenvolvido, e sua implementação e desafios técnicos são discutidos. Como aplicação, discutimos brevemente conceitos da Dinâmica de Formas, um modelo alternativo de gravitação, que sobre o PNCG fornece setas do tempo gravitacionais - direções para o qual o sistema evolui e que dependem somente das posições dos corpos -, e através de simulações numéricas as visualizamos.

Palavras-chave: Problema de N-Corpos Gravitacional. Simulação numérica. Métodos simpléticos. Mecânica Hamiltoniana. Setas do tempo.

Abstract

Octavio Augusto Potalej. **Numerical simulation of gravitational N-body problem.**

Capstone Project Report (Bachelor). Institute of Mathematics and Statistics, University of São Paulo, São Paulo, 2024.

The evolution of gravitational systems can be described through the Gravitational N-Body Problem (GNBP), whose numerical simulation allows visualizing and testing qualitative properties of the Problem. The simulations are performed through temporal numerical integrators, and these exist in several types. We present common methods, but also symplectic methods, which have the property of conserving the symplectic structure of the problem, presented in a chapter dedicated to Analytical Mechanics, focusing on the Hamiltonian Formulation. We also discuss a numerical corrector based on first integrals, and ways to deal with collisions and near-collisions of bodies, using elastic shocks and a damping in the potential. A GNBP simulator in Fortran was developed, and its implementation and technical challenges are discussed. As an application, we briefly discuss concepts of Shape Dynamics, an alternative model of gravitation, which over the GNBP provides gravitational arrows of time - directions in which the system evolves and which depend only on the positions of the bodies -, and through numerical simulations we visualize them.

Keywords: Gravitational N-Body Problem. Numerical simulation. Symplectic methods. Hamiltonian Mechanics. Arrows of time.

Sumário

1	Introdução	1
2	Revisão de mecânica	5
2.1	De Newton a Lagrange	5
2.1.1	Equações de movimento na mecânica newtoniana	5
2.1.2	Ação e Lagrangianos	7
2.1.3	Transformação de Legendre e Equações de Hamilton	9
2.2	A Mecânica Hamiltoniana	12
2.2.1	k -formas e k -formas diferenciais	12
2.2.2	Espaços vetoriais simpléticos	17
2.2.3	Variedades simpléticas	19
2.2.4	Campos hamiltonianos	21
2.2.5	Transformações canônicas	22
3	O Problema de N-Corpos Gravitacional	25
3.1	Enunciado	25
3.2	Integrais primeiras	26
3.3	Questões de escala	27
3.4	Colisões	31
3.5	Estabilidade	33
3.6	A Dinâmica de Formas	35
3.6.1	Contextualização e motivação	36
3.6.2	Eliminação da escala	37
3.6.3	Evolução de um sistema adimensional e complexidade	38
3.6.4	Equações de movimento no espaço de formas S	40
3.6.5	A escala como fricção em S	40
3.6.6	Observações	41
4	Métodos numéricos	43

4.1	Conceitos básicos de integração numérica	44
4.2	Métodos tradicionais de integração numérica	47
4.2.1	Integradores básicos de primeira ordem	47
4.2.2	Métodos de Runge-Kutta	49
4.2.3	Estabilidade dos integradores tradicionais	52
4.3	Integradores simpléticos	57
4.3.1	Obtenção de métodos via separação	57
4.3.2	Métodos via composição de integradores de segunda ordem	59
4.3.3	Métodos de Runge-Kutta Simpléticos e de Runge-Kutta-Nyström	61
4.3.4	Comparações entre os métodos apresentados	62
4.4	Corretor numérico	63
5	Implementação e aplicações	67
5.1	Ferramentas	67
5.1.1	Escolha da linguagem de programação	67
5.1.2	Estrutura do programa	68
5.1.3	Precisão e erros de ponto flutuante	69
5.1.4	Paralelização	70
5.1.5	Entrada e saída de dados	72
5.2	Valores iniciais	73
5.2.1	Condicionamento das integrais primeiras	74
5.2.2	Condições de estabilidade	78
5.3	Colisões	79
5.4	Uso do corretor numérico	81
5.5	Aplicação: Dinâmica de Formas	84
5.5.1	Problemas de 3 corpos	84
5.5.2	Problemas de 20 e 100 corpos	86
5.5.3	Problemas de 1000 corpos	88
6	Conclusão	93
Apêndices		
A	Problemas-modelo para as simulações	95
B	Demonstrações de propriedades da Dinâmica de Formas	99

Capítulo 1

Introdução

Os fenômenos celestes encantam e interessam o ser humano desde os seus primórdios, mas foi apenas no século XVII que uma primeira descrição concisa e global do movimento foi apresentada por Isaac Newton. Se até então o movimento dos corpos celestes era descrito através de modelos específicos, como as Leis de Kepler, através da Lei da Gravitação Universal foi possível modelar o movimento de quase qualquer tipo de sistema planetário, estelar ou galático.

Isso foi possível graças ao novo ferramental desenvolvido na mesma época: o cálculo diferencial e integral. O movimento passou a ser descrito por equações nem sempre explicitamente solucionáveis, mas que forneciam importantes resultados qualitativos sobre o problema. No caso de sistemas gravitacionais, o movimento de um sistema com N corpos é descrito pela Lei da Gravitação Universal de Newton:

$$m_a \ddot{\mathbf{q}}_a = \sum_{b \neq a} G \frac{m_a m_b}{\|\mathbf{q}_b - \mathbf{q}_a\|}, \quad \text{para } a = 1, 2, \dots, N.$$

Se é fixado um conjunto de valores iniciais a partir dos quais o sistema evolui através da Lei de Gravitação, tem-se então o chamado *Problema de N-Corpos Gravitacional* (PNCG). Existem outras formas de enunciar o problema, como através de uma Equação de Poisson, mas nos manteremos na formulação direta do problema.

Devido à já mencionada falta de soluções explícitas no geral, o PNCG foi muitas vezes alvo de métodos criativos para simulá-lo. Embora métodos de quadratura já fossem utilizados por babilônios há mais de 2 mil anos para prever a posição de Júpiter (OSSENDRIJVER, 2016), a dificuldade de uma simulação de grande porte só começou a ser resolvida na metade do século XX.

Nessa época, é memorável por sua inventividade uma simulação de duas galáxias realizada por Erik Holmberg com o uso de 37 lâmpadas para cada uma (HOLMBERG, 1941). A odisseia de Holmberg com este experimento, embora extremamente trabalhoso e computacionalmente primitivo, forneceu resultados qualitativos novos acerca da colisão de galáxias que décadas mais tarde se comprovaram através de observações de galáxias reais.

Alguns anos depois, o desenvolvimento da computação permitiu o início de simulações específicas de N -corpos, com foco na observação das trajetórias individuais. As simulações eram feitas através de métodos de integração numérica dos mais variados tipos e ordens de convergência. No entanto, já em 1964, o erro exponencial nas trajetórias que divergiam numericamente foi observado e provado e a divergência de soluções levou Richard Miller (e vários outros) a questionar a validade das simulações de N -corpos (MILLER, 1964).

Apesar disso, como o próprio experimento de Holmberg já provava, a precisão de trajetórias individuais nem sempre é necessária para obter resultados válidos. De fato, a simulação do PNCG para grandes valores de N é estatisticamente válida no geral, ainda que haja divergência entre as trajetórias obtidas por diferentes métodos (BOEKHOLT e PORTEGIES ZWART, 2015). É evidente então que a validade de uma simulação depende de seu contexto e de seu objetivo, mais do que de sua verossimilhança absoluta. Como o cosmólogo Andrew Pontzen sintetiza,

As simulações são um canal no processo da ciência. Elas não fornecem uma hipótese; isso é dado pela teoria subjacente. Elas não fornecem dados; eles são fornecidos pelo experimento ou observação específica. Em vez disso, elas fornecem a conexão entre esses dois, prevendo o que os dados *seriam* sob cada hipótese. Há uma complicação pois previsão é sempre aproximada [...]. Entender se as aproximações estão ou não distorcendo uma comparação específica é a arte da simulação. (PONTZEN, 2023, pg. 172)

Neste trabalho, nossa tática de simulação do PNCG é o foco na conservação das integrais primeiras do sistema, ou seja, de quantidade que são conservadas no decorrer de uma trajetória, como a energia total. Isso se deve aos objetivos definidos: *visualizar resultados teóricos e aprender a fazer simulações eficientes*.

O primeiro objetivo foi o primeiro também cronologicamente. Este trabalho começou com o estudo de um modelo de gravitação alternativo chamado *Dinâmica de Formas* (ou *Shape Dynamics*, do inglês) e a vontade de visualizarmos nós mesmos os resultados numéricos apresentados pelos autores da teoria no artigo BARBOUR, KOSLOWSKI *et al.*, 2014a.

Disso decorreu a necessidade de aprender sobre o PNCG, sobre suas propriedades analíticas e os resultados já conhecidos de sua dinâmica. Também veio a necessidade de aprender sobre métodos de integração numérica eficientes, o que naturalmente levou aos métodos de integração simpléticos. A partir disso foi necessário explorar a Mecânica Hamiltoniana, uma vez que os termos da Dinâmica de Formas também estavam nessa linguagem diferente da Mecânica Newtoniana tradicional. Em meio a tudo isso, veio o segundo objetivo, que é a junção de toda a teoria estudada e o desenvolvimento de um simulador numérico nosso, disponível em <https://github.com/potalej/gravidade-fortran> (POTALEJ, 2024).

Assim, o trabalho foi estruturado como segue. Em seguida a esta seção introdutória, o capítulo 2 é uma introdução às diferentes formulações da mecânica: Newtoniana, Lagrangiana e Hamiltoniana. Devido ao interesse nos integradores simpléticos, a seção de Mecânica Hamiltoniana se aprofunda um pouco mais em formas diferenciais e conceitos de geometria simplética para justificar melhor a preferência no uso de métodos simpléticos

para simulações.

O capítulo 3 enuncia o PNCG de fato, e tem em sua última seção uma introdução à Dinâmica de Formas aplicada no PNCG, com foco na predição de setas do tempo gravitacionais. Algumas demonstrações da seção de Dinâmica de Formas foram direcionadas para o apêndice 2, de modo a facilitar a leitura.

O capítulo 4 trata de métodos numéricos de passo único, começando com integradores tradicionais e partindo para integradores simpléticos. Além disso, um corretor numérico (independente do integrador) também é apresentado. Os testes neste e no próximo capítulo são feitos a partir de problemas-modelo de N-corpos, isto é, condições iniciais escolhidas e padronizadas. Estes constam no primeiro apêndice.

O capítulo 5 é a consolidação da teoria. Apresentamos a estrutura do programa desenvolvido e questões práticas que tivemos nesse desenvolvimento. Também apresentamos a forma com a qual lidamos com a geração de valores iniciais para o PNCG, o uso de colisões e do corretor. Por fim, encerramos o capítulo com a visualização dos resultados previstos da Dinâmica de Formas.

Há um último capítulo dedicado à conclusão, no qual discorremos sobre os resultados obtidos e as dificuldades que atravessaram este trabalho.

Capítulo 2

Revisão de mecânica

Este capítulo tem como objetivo apresentar brevemente conceitos importantes da mecânica analítica, com foco na formulação hamiltoniana. Apesar do foco central deste trabalho ser a simulação do Problema de N-Corpos Gravitacional (PNCG), a maior parte do conteúdo aqui apresentado se aplica a outros problemas físicos graças à solidez teórica da mecânica analítica.

Partiremos da Mecânica Newtoniana e de seus conceitos fundamentais, atravessaremos rapidamente a Mecânica Lagrangiana e através da transformação de Legendre seremos levados às equações de Hamilton, as quais abrem as portas para a Mecânica Hamiltoniana.

O PNCG é um problema mecânico conservativo, então nas simulações utilizamos muito frequentemente os métodos chamados *simpléticos*, apresentados no capítulo 4. Por isso, uma parte considerável deste capítulo de mecânica é destinado à apresentação da teoria de formas diferenciais, o básico da geometria simplética e a teoria de transformações canônicas.

2.1 De Newton a Lagrange

Nesta seção, são revisados brevemente conceitos de Mecânica Newtoniana e de Mecânica Lagrangiana, partindo da 2^a Lei de Newton, passando por integrais primeiras, o funcional de ação, funções lagrangianas e encerrando com a Transformação de Legendre e as Equações de Hamilton. O intuito é dar base para a seção seguinte, relativa a Mecânica Hamiltoniana.

2.1.1 Equações de movimento na mecânica newtoniana

Na mecânica newtoniana, os objetos são descritos matematicamente a partir de dois referenciais absolutos: o espaço e o tempo. As equações de movimento que parametrizam tais objetos são dadas pela 2^a Lei de Newton.

Definição 2.1.1 (2^a Lei de Newton). *Um objeto de massa $m > 0$, posição inicial $\mathbf{q}_0 \in M \subseteq \mathbb{R}^n$ e sujeito a um campo de forças $\mathbf{F} : I \times M \rightarrow M$, $I \subseteq \mathbb{R}$, tem sua trajetória $\mathbf{q} : I \subseteq \mathbb{R} \rightarrow M$*

descrita pelo seguinte *Problema de Cauchy*:

$$\begin{cases} m\ddot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{F}(t, \mathbf{q}(t)), \forall t \in I, \\ \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0, \dot{\mathbf{q}}(t_0) = \dot{\mathbf{q}}_0, t_0 \in I. \end{cases} \quad (2.1)$$

No caso do PNCG, tratado com detalhes no capítulo 3, o campo de forças depende somente da posição, e como as equações são autônomas (isto é, não dependem explicitamente do tempo), escrevemos na forma de notação reduzida:

$$m\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{F}(\mathbf{q}), \quad (2.2)$$

ou, ainda, tomando $\mathbf{v}(t) \in T_{\mathbf{q}(t)}M$, onde $T_{\mathbf{q}(t)}M$ é o espaço tangente a M em $\mathbf{q}(t)$ ¹, e definindo $\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(t_0)$, podemos escrever na seguinte forma:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{v}, \\ \dot{\mathbf{v}} = \frac{1}{m}\mathbf{F}(\mathbf{q}), \\ \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0, \mathbf{v}(t_0) = \mathbf{v}_0. \end{cases} \quad (2.3)$$

Nos sistemas newtonianos, um conceito que aparece naturalmente é a energia total.

Definição 2.1.2 (Função potencial). *Quando \mathbf{F} é um campo gradiente, isto é, existe uma função suave $V : M \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $\mathbf{F} = -\nabla V$, dizemos que V é uma **função potencial** do sistema.*

Definição 2.1.3 (Energia total). *A energia total E de um sistema newtoniano com função potencial V é dada por*

$$E(t, \mathbf{q}, \mathbf{v}) = \frac{1}{2}m\|\mathbf{v}\|^2 + V(\mathbf{q}), \quad (2.4)$$

onde $\frac{1}{2}m\|\mathbf{v}\|^2$ é chamada de **energia cinética** e a função potencial é chamada de **energia potencial**.

A energia total, quando não depende explicitamente do tempo e o campo é fechado (ou seja, não há forçantes), possui a propriedade de ser uma *integral primeira* do sistema, isto é, é constante em relação ao tempo.

Definição 2.1.4 (Integral primeira). *Um observável f (uma função que depende de t, \mathbf{q} e \mathbf{v}) é dito uma **integral primeira** se for pelo menos \mathcal{C}^1 e*

$$\frac{d}{dt}f(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t)) = 0, \forall t \in I. \quad (2.5)$$

Teorema 2.1.1. *A energia total $E(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t))$ de um sistema newtoniano é uma integral primeira.*

¹ Os conceitos de espaços e fibrados tangente e cotangente são melhor explorados na seção 2.2.1. No momento, para visualizar TM qualquer basta pensar em uma derivada temporal.

Demonstração. Basta derivar:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}E(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t)) &= \frac{1}{2}m\frac{d}{dt}(\|\mathbf{v}\|^2) + \frac{d}{dt}V(\mathbf{q}(t)) \\ &= \frac{1}{2}m2\langle \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}} \rangle + \langle \nabla V, \mathbf{v} \rangle \\ &= \langle \mathbf{v}, \mathbf{F} \rangle - \langle \mathbf{F}, \mathbf{v} \rangle = 0.\end{aligned}$$

□

Isso significa que a partir de um par de valores iniciais $(\mathbf{q}_0, \mathbf{v}_0)$, obtém-se a energia total de toda a trajetória. Analiticamente, quando um sistema em \mathbb{R}^n possui k -integrais primeiras não-triviais, é possível remodelar o sistema para trabalhar em um espaço reduzido \mathbb{R}^{n-k} (PERA GARCIA e BARROS, 1995, pgs. 93–94). Já numericamente, isso é interessante do ponto de vista da precisão numérica, pois, uma vez que a energia deve se manter constante durante a trajetória, sua variação numérica é uma forma de mensurar os erros nas aproximações.

2.1.2 Ação e Lagrangianos

Na modelagem obtida, as trajetórias dos objetos são descritas localmente, pois as equações de movimento muitas vezes não possuem soluções para todo $t \in \mathbb{R}$, estando no geral definidas apenas na vizinhança do instante inicial.

Para movimentos em circuitos definidos em espaços conexos, existe ao menos uma curva ligando os pontos inicial e final. O critério para determinar qual curva corresponde a um dado conjunto de valores iniciais é dado a partir de uma métrica e , com ela, a atribuição de um valor real a cada curva $\gamma(t) = (\mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t))$ em $[t_0, t_f]$, o que pode ser feito da seguinte maneira:

$$S(\gamma) = \int_{t_0}^{t_f} L(\gamma(t))dt = \int_{t_0}^{t_f} L(\mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t))dt. \quad (2.6)$$

Aqui S é um funcional chamado *ação* e L é uma função que a princípio pode ser qualquer. Tomando $L(\mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t)) = \sqrt{1 + \mathbf{v}(t)}$, por exemplo, S mede o comprimento de γ .

Podemos definir uma *aproximação* ou *deformação* $\tilde{\gamma}$ de γ como $\tilde{\gamma}(t) = \gamma(t) + h(t)$, para alguma curva h definida no mesmo espaço de γ .

Definição 2.1.5. Um funcional Φ é dito diferenciável se $\Phi(\gamma + h) - \Phi(\gamma) = F + R$, onde F depende linearmente de h e $R(h, \gamma) = O(h^2)$, no sentido de que, para $|h| < \epsilon$ e $|dh/dt| < \epsilon$, temos $|R| < C\epsilon^2$. A parte linear $F(h)$ é chamada de *diferencial*.

Teorema 2.1.2. O funcional de ação é diferenciável, e seu diferencial é dado por

$$F(h) = \int_{t_0}^{t_f} \left[\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \right] h dt \quad (2.7)$$

Demonstração. Temos que:

$$\begin{aligned} S(\gamma + h) - S(\gamma) &= \int_{t_0}^{t_f} [L(\mathbf{q} + h, \mathbf{v} + \dot{h}) - L(\mathbf{q}, \mathbf{v})] dt \\ &= \int_{t=0}^{t_f} \left[\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} h + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \dot{h} \right] dt + O(h^2) = F(h) + R, \end{aligned}$$

pois

$$L(\mathbf{q} + h, \mathbf{v} + \dot{h}) = L(\mathbf{q}, \mathbf{v}) + \langle (h, \dot{h}), \nabla L(\mathbf{q}, \mathbf{v}) \rangle + O(h^2).$$

Integrando por partes, obtemos:

$$\int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \dot{h} dt = - \int_{t_0}^{t_f} h \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \right) dt + \left(h \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \right) \Big|_{t_0}^{t_f}.$$

Uma vez que $h(t_0) = h(t_f) = 0$ (pela definição de deformação), então obtemos o esperado. \square

A partir do conceito de diferencial, é intuitiva a definição de *extremos* ou *curvas críticas*, análoga ao conceito de *pontos críticos* de funções, sendo “pontos” (em um espaço de funções) que maximizam ou minimizam o funcional.

Definição 2.1.6. Um extremo de um funcional diferenciável $\Phi(\gamma)$ é uma curva γ tal que $F(h, \gamma) = 0$, para todo h .

Teorema 2.1.3. A curva γ é um extremo de S se, e somente se,

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \right) = 0, \quad \forall t \in [t_0, t_f]. \quad (2.8)$$

Demonstração. Pelo teorema 2.1.2, $F(h) = 0$ se e somente se $h = 0$ ou

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \right) = 0.$$

Uma vez que $h \neq 0$ (pois é uma deformação), temos o esperado. \square

A equação (2.8) é chamada de *Equação de Euler-Lagrange*. Essa equação, munida do *Princípio de Hamilton*, caracteriza o movimento na mecânica lagrangiana.

Teorema 2.1.4 (Princípio de Hamilton). A 2^a Lei de Newton em (2.1) coincide com extremos do funcional de ação

$$S(\gamma) = \int_{t_0}^{t_f} L dt,$$

onde $L = T - V$ é a diferença entre as energias cinética e potencial.

Demonstração. Basta derivar:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}, \quad \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \right) = m \mathbf{v} \Rightarrow \frac{d}{dt} (m \mathbf{v}) = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}} = F(\mathbf{q}).$$

□

Definição 2.1.7. A função $L(q, v) = \frac{1}{2}mv^2 - V$ é a função lagrangiana ou lagrangiano do sistema, q são as coordenadas generalizadas, v são as velocidades generalizadas, $\partial L/\partial v = p$ são os momentos generalizados e $\partial L/\partial q$ são as forças generalizadas.

A mecânica lagrangiana é amplamente utilizada para modelar diversos problemas, desde sistemas mecânicos simples com vínculos até o próprio Modelo Padrão de partículas. No entanto, para o PNCG há uma formulação mais interessante que é a *mecânica hamiltoniana*. Ainda assim, o conceito de ação é relevante, como por exemplo na formulação da *Dinâmica de Formas*, apresentada brevemente na seção 3.6.

2.1.3 Transformação de Legendre e Equações de Hamilton

Observe que até então o par considerado era (q, v) , ou seja, pontos no fibrado tangente de M . Na definição 2.1.7 foi apresentado o conceito de momento generalizado, e o par (q, p) se encontra no fibrado cotangente de M . Tal construção de coordenadas é explorada com um pouco mais de detalhes na seção 2.2. Para o que interessa agora, a transformação de Legendre é uma aplicação entre os dois espaços.

Definição 2.1.8. Sejam $U \subseteq \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ aberto e $X : U \rightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^{k+2} . Dizemos que X é Legendre transformável em x se a aplicação

$$F : (\alpha, x) \in U \mapsto (\alpha, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$$

definida por

$$y = \frac{\partial X}{\partial x}(x, \alpha), \quad \alpha = \alpha$$

é um difeomorfismo \mathcal{C}^{k+1} sobre a imagem $F(U)$.

Definição 2.1.9. Considere X Legendre transformável, nos mesmos espaços. A aplicação $Y : V \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$(\alpha, y) = F(\alpha, x) \Rightarrow X(\alpha, x) + Y(\alpha, y) = \langle x, y \rangle$$

é chamada transformada de Legendre de X . De maneira explícita:

$$Y(y, \alpha) = (F^{-1})(y, \alpha)y - X(F^{-1}(y, \alpha)),$$

e a transformação $y = \partial X/\partial x$ é chamada **transformação de Legendre**.

É mister observar que a transformada de Legendre é involutiva, ou seja, se X é Legendre transformável com transformada Y , então Y é Legendre transformável com transformada X (PERA GARCIA e BARROS, 1995, pg. 79). Além disso, trata-se de uma aplicação que leva uma função a um funcional linear definido no dual do espaço original.

Partindo de Lagrange, a função lagrangiana $L = \frac{1}{2}mv^2 - V$ é uma função suave, uma vez que V é suave, e o momento generalizado também o é, então a aplicação que leva (q, v) em (q, p) é um difeomorfismo suave. Assim, L é uma função Legendre transformável em relação a v .

Definição 2.1.10 (Função hamiltoniana). *A transformada de Legendre H de L é chamada de função hamiltoniana e é dada por*

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \langle \mathbf{v}, \mathbf{p} \rangle - L(\mathbf{q}, \mathbf{v}) \quad (2.9)$$

Observação 2.1.1. Quando $L = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - V$, a função hamiltoniana corresponde à energia total como definida em (2.4), pois

$$H = \langle \mathbf{v}, \mathbf{p} \rangle - L = \left\langle \mathbf{v}, \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \right\rangle - \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + V = m\|\mathbf{v}\|^2 - \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + V = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + V.$$

Aqui, a energia cinética pode ser escrita em função do momento generalizado:

$$T(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (2.10)$$

Enquanto L está definida sobre o fibrado tangente TM , H estará definida sobre o fibrado cotangente T^*M , que é o fibrado dual de TM (Tu, 2010, pg. 192). A função hamiltoniana também fornece um novo conjunto de equações de movimento, chamadas *equações de Hamilton*.

Teorema 2.1.5 (Equações de Hamilton). *A função hamiltoniana gera as seguintes equações de movimento:*

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}.$$

Demonstração. Basta derivar (2.9):

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} = \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}} = -\dot{\mathbf{p}}, \quad \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{v} - \left(\mathbf{p} - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \right) \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{v} = \dot{\mathbf{q}}.$$

□

Definindo $\mathbf{z} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$, há uma forma reduzida para as equações de Hamilton:

$$\dot{\mathbf{z}}(t) = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}(t)) = \boldsymbol{\Omega} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}(t)),$$

onde $\boldsymbol{\Omega}$ é chamada **matriz simplética**. Este nome será justificado na próxima seção.

A importância da formulação hamiltoniana começa a aparecer a partir do seguinte teorema.

Teorema 2.1.6. *O fluxo hamiltoniano $\varphi = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ dado por $\frac{d}{dt}\varphi = V$, onde $V = (\dot{\mathbf{q}}, \dot{\mathbf{p}}) = (\nabla_{\mathbf{p}} H, -\nabla_{\mathbf{q}} H)$, conserva volume.*

Antes de prová-lo, é necessário um lema.

Lema 2.1.7. Sejam $\varphi : I \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ tais que

$$\frac{d\varphi}{dt} = F(\varphi(t)),$$

e suponha que $\nabla \cdot F = 0$. Então sendo $R_0 \subseteq \mathbb{R}^n$ uma região compacta cuja evolução é dada por $R(t) = \{\varphi(t) | \varphi(0) \in R_0\}$, o volume de $R(t)$ é constante no tempo.

Demonstração. O volume $V(t)$ de $R(t)$ é dado por

$$V(t) = \int_{R(t)} d\mathbf{x}.$$

Assim, para um pequeno $dt > 0$, tem-se que

$$V(t + dt) = \int_{R(t)} \det \frac{\partial \varphi_i(t + dt)}{\partial \varphi_j(t)} d\mathbf{x},$$

onde o último termo é o determinante da matriz jacobiana da aplicação que leva $\varphi(t)$ a $\varphi(t + dt)$, dada a mudança de coordenadas imposta. Pela definição de derivada,

$$\varphi_i(t + dt) = \varphi_i(t) + V_i(\varphi(t))dt + O(dt^2),$$

logo

$$\frac{\partial \varphi_i(t + dt)}{\partial \varphi_j(t)} = \delta_{ij} + \frac{\partial V_i}{\partial x_j} dt + O(dt^2).$$

Considere agora uma matriz A qualquer, com autovalores λ_i . A matriz $I + \epsilon A$, para ϵ suficientemente pequeno, terá autovalores $1 + \epsilon \lambda_i$. Dessa forma, tem-se que:

$$\det(I + \epsilon A) = \prod (1 + \epsilon \lambda_i) = 1 + \epsilon \sum_i \lambda_i + O(\epsilon^2) = 1 + \epsilon \operatorname{tr} A + O(\epsilon^2).$$

Dessa forma, o volume $V(t + dt)$ pode ser escrito como

$$\begin{aligned} V(t + dt) &= \int_{R(t)} \left| \delta_i^j + \frac{\partial V_i}{\partial x_j} dt + O(dt^2) \right| d\mathbf{x} \\ &= \int_{R(t)} (1 + \nabla \cdot V dt + O(dt^2)) d\mathbf{x} \\ &= V(t) + \int_{R(t)} (\nabla \cdot V dt) d\mathbf{x} + O(dt^2) \\ \therefore \frac{dV}{dt} &= \int_{R(t)} \nabla \cdot V d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Assim, se $\nabla \cdot V = 0$, volume do fluxo não varia com o tempo. \square

Demonstração. (Do teorema) Conforme o lema 2.1.7, basta verificar que o divergente do

campo hamiltoniano é nulo.

$$\nabla \cdot V = \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} + \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} = \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p} - \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q} = 0,$$

pois H é suave. □

Isso significa que no espaço das coordenadas (q, p) , também chamado de *espaço de fases*, o fluxo tem seu volume conservado na órbita das soluções.

2.2 A Mecânica Hamiltoniana

Esta seção tem o objetivo de apresentar brevemente conceitos de geometria simplética e relacioná-los com a mecânica hamiltoniana. Isto é particularmente interessante para uma melhor compreensão dos integradores simpléticos apresentados mais adiante.

Começando por formas e formas diferenciais, partiremos para espaços vetoriais simpléticos e o salto para uma breve apresentação de variedades simpléticas não será tão difícil. Definindo formas exatas, seremos capazes de apresentar sistemas hamiltonianos e chegar novamente nas equações de Hamilton, dessa vez utilizando os parênteses de Poisson. Ao final, seremos capazes de caracterizar difeomorfismos que conservam a estrutura simplética de um sistema, os *simplectomorfismos*, o que no caso hamiltoniano implica na conservação do volume no espaço de fases.

A bibliografia utilizada e recomendada para este conteúdo é **FENG e QIN, 2010**, **TU, 2010**, **ARNOLD, 2013** e **SILVA, 2001**.

2.2.1 k-formas e k-formas diferenciais

As formas diferenciais são um meio de estender o cálculo vetorial para dimensões superiores e variedades, sendo ferramentas fundamentais para a geometria simplética e para a mecânica hamiltoniana. Os conceitos mais simples começam pelas 1-formas.

Definição 2.2.1 (1-formas). *Uma 1-forma básica $dx_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma aplicação linear tal que*

$$dx_i(\mathbf{u}) = u_i, \mathbf{u} = (u_1, \dots, u_n) \in \mathbb{R}^n.$$

Uma 1-forma geral $\omega_A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma combinação linear de 1-formas básicas em \mathbb{R}^n :

$$\omega_A = \langle dx, \mathbf{A} \rangle = \sum_{i=1}^n A_i dx_i, \quad \mathbf{A} \text{ const.}$$

É intuitivo da definição de 1-forma geral que estas são elementos do dual do espaço em que estão definidas, em particular de $(\mathbb{R}^n)^*$. Por isso, são também chamadas *covetores* do espaço. O espaço de todas as 1-formas sobre \mathbb{R}^n é denotado por $\Lambda^1(\mathbb{R}^n)$.

Com as 1-formas em mãos, é possível definir uma operação entre elas: o *produto exterior*.

Definição 2.2.2 (Produto exterior de 1-formas). *Sejam $dx_{a_1}, \dots, dx_{a_m}$ m 1-formas básicas sobre \mathbb{R}^n . O seu produto exterior é a aplicação m -linear e antissimétrica*

$$(dx_{a_1} \wedge \dots \wedge dx_{a_m})(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m) = \det [dx_{a_i}(\mathbf{u}_j)]_{1 \leq i, j \leq m}, \quad \mathbf{u}_i \in \mathbb{R}^n.$$

Sendo assim, o produto de m 1-formas trata-se de um m -hipervolume orientado. As k -formas básicas decorrem da última definição.

Definição 2.2.3 (k -formas). *Uma k -forma $\omega : (\mathbb{R}^n)^k \rightarrow \mathbb{R}$ é uma aplicação k -linear e antissimétrica. A k -forma ω é dita básica se for da forma*

$$\omega = dx_I = dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}, \quad I = (i_1, \dots, i_k).$$

O espaço vetorial das k -formas sobre \mathbb{R}^n é denotado por $\Lambda^k(\mathbb{R}^n)$.

Definição 2.2.4 (Produto exterior). *Sejam ω uma k -forma básica e η uma m -forma básica sobre \mathbb{R}^n dadas por:*

$$\omega = dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}, \quad \eta = dx_{j_1} \wedge \dots \wedge dx_{j_m}.$$

O produto exterior $\omega \wedge \eta$ é uma $(k+m)$ -forma definida por

$$\omega \wedge \eta = dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k} \wedge dx_{j_1} \wedge \dots \wedge dx_{j_m}.$$

O caso de formas gerais se define por linearidade.

Para um vetor $\xi \in \mathbb{R}^n$ que parte de 0 e vai à ξ , podemos tomar um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ e temos um elemento $(x, \xi) \in T_x \mathbb{R}^n$ do espaço tangente que parte de x e vai a $x + \xi$. O espaço tangente forma um espaço vetorial sobre \mathbb{R}^n , com base $(x, \hat{e}_i)_{i=1, \dots, n}$. A partir disso podemos tomar o conjunto

$$T\mathbb{R}^n = \bigcup_{x \in \mathbb{R}^n} T_x \mathbb{R}^n,$$

chamado de *fibrado tangente* a \mathbb{R}^n .

Considere agora a aplicação $\pi : T\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ definida por $\pi(x, \xi) = x$, $\forall (x, \xi) \in T_x \mathbb{R}^n$. Tal aplicação é chamada de *projeção do fibrado tangente*, e $\pi^{-1}(x) = T_x \mathbb{R}^n$ é chamada de *fibra* do fibrado tangente sobre o ponto x .

Denotamos por $T_x^* \mathbb{R}^n$ o espaço dual de $T_x \mathbb{R}^n$, chamado de *espaço cotangente* a \mathbb{R}^n em x . Seus elementos são chamados de co-vetores e

$$T^* \mathbb{R}^n = \bigcup_{x \in \mathbb{R}^n} T_x^* \mathbb{R}^n$$

é denominado *fibrado cotangente*. Podemos definir a projeção do fibrado cotangente de maneira análoga ao já feito:

$$\pi^* : T^* \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad \pi^*(x, \omega) = x, \quad \forall (x, \omega) \in T_x^* \mathbb{R}^n.$$

O fibrado cotangente pode ser equipado com a topologia produto em $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$, e nesse caso

tem-se uma variedade $2n$ -dimensional.

A partir disso, podemos tomar as k -formas definidas sobre cada $T_x \mathbb{R}^n$ no conjunto $\Lambda^k(T_x \mathbb{R}^n)$, e temos o fibrado de k -formas

$$\Lambda^k(\mathbb{R}^n) = \bigcup_{x \in \mathbb{R}^n} \Lambda^k(T_x \mathbb{R}^n).$$

Isso permite generalizar o conceito de k -formas para k -formas diferenciais.

Definição 2.2.5. *Uma k -forma diferencial é uma aplicação $\omega : \mathbb{R}^n \rightarrow \Lambda^k(\mathbb{R}^n)$ tal que $\omega(x) \in \Lambda^k(T_x \mathbb{R}^n)$. Podemos escrever ω como:*

$$\omega(x) := \omega_x = \sum_{i_1 < \dots < i_k} A_{i_1, \dots, i_k}(x) dx_{i_1}(x) \wedge \dots \wedge dx_{i_k}(x) = \sum_I A_I(x) dx_I(x),$$

para $I = (i_1, \dots, i_k)$ e onde $A_I(x)$ é uma função sobre \mathbb{R}^n .

Uma k -forma diferencial carrega as propriedades diferenciais de sua função A_I , isto é, a primeira é contínua, diferenciável, etc., se a segunda for contínua, diferenciável, etc., respectivamente. No geral, consideraremos k -formas diferenciais suaves, e denotamos por $\Omega^k(\mathbb{R}^n)$ o espaço das k -formas diferenciais suaves sobre \mathbb{R}^n .

Observe que quando $k = 0$, $\Omega^0(U) = \mathcal{C}^\infty(U)$, para $U \subseteq \mathbb{R}^n$. Neste espaço, uma operação importante é a diferenciação, a qual já é conhecida.

Definição 2.2.6. *A derivada exterior de uma 0-forma $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ suave é o diferencial df :*

$$df = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i.$$

Veja que $df \in \Omega^1(U)$, pois df é uma combinação de formas básicas com funções suaves $\partial f / \partial x_i$. A extensão do conceito para k -formas é como segue.

Definição 2.2.7 (Derivada exterior). *Seja $\omega = \sum_I A_I dx_I$ uma k -forma em U . Então:*

$$d\omega = \sum_I dA_I \wedge dx_I = \sum_I \left(\sum_j \frac{\partial a_I}{\partial x_j} dx_j \right) \wedge dx_I \in \Omega^{k+1}(U).$$

Um corolário inusitado à primeira vista é que a segunda derivada exterior sempre é anula.

Corolário 2.2.0.1. *Seja ω uma k -forma em U aberto de \mathbb{R}^n . Então $d(d\omega) = 0$.*

Demonstração. Uma vez que a derivação exterior para k -formas é apenas uma generalização da definição para 0-formas, mostrar o resultado para f 0-forma em U é suficiente. Basta alguma álgebra:

$$d(df) = \sum_i \left(\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\partial f}{\partial x_i} \right] dx_j \right) \wedge dx_i.$$

Por hipótese, f é suave, então os operadores diferenciais comutam, e graças à antissimetria das formas básicas dx_i , tem-se que

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) dx_j \wedge dx_i + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right) dx_i \wedge dx_j = 0, \forall i, j.$$

□

Outro ponto que decorre imediatamente da definição 2.2.7 é que existem $(k+1)$ -formas que podem ser escritas como o diferencial de k -formas definidas no mesmo conjunto.

Definição 2.2.8 (Formas exatas e formas fechadas). *Uma $(k+1)$ -forma ω em U aberto de \mathbb{R}^n é dita **exata** se existir uma k -forma η em U tal que $\omega = d\eta$. Dizemos que uma k -forma ν em U é **fechada** se $d\nu = 0$.*

Corolário 2.2.0.2. *Toda forma exata é fechada.*

Demonstração. Seja ω uma $k+1$ -forma exata em U tal que $\omega = d\eta$, η k -forma em U . Então, por 2.2.0.1: $d\omega = d(d\eta) = 0$. □

A derivação exterior é um importante operador entre os espaços Ω^k e Ω^{k+1} . Existem outros dois operadores de derivação relevantes para este trabalho e que relacionam os espaços Ω^k de outra forma: a derivada de Lie e o produto interior.

A derivada de Lie consiste na observação da variação de uma forma diferencial em relação a um campo vetorial X em um ponto p . Isso é possível pela garantia da dependência contínua entre um fluxo local $F_t(q)$ e seu valor inicial q definidos em uma vizinhança de p , o qual se relaciona com X da seguinte forma (Tu, 2010, pg. 155):

$$\frac{d}{dt} \Big|_t F_t(q) = X(F(q)), \quad F_0(q) = q.$$

Definição 2.2.9 (Derivada de Lie). *Sejam M variedade, $p \in M$ e U vizinhança de p . Para um campo vetorial suave X com fluxo local $\varphi : U \rightarrow M$ e uma k -forma suave ω em M , a **derivada de Lie** $\mathcal{L}_X \omega$ em p é*

$$(\mathcal{L}_X \omega)_p = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{(\varphi^* \omega)_p - \omega_p}{t} = \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} (\varphi^* \omega)_p,$$

onde φ_t^* é o operador **pullback** definido por

$$(\varphi^* \omega)_p(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k) = (\omega)_{\varphi(p)}(d\varphi_p(\mathbf{u}_1), \dots, d\varphi_p(\mathbf{u}_k)), \quad \mathbf{u}_j \in T_p M, \forall j.$$

Já no produto interior, tem-se uma derivação de grau -1 (ou uma *anti-derivação*), na qual uma k -forma é levada a uma $(k-1)$ -forma a partir da fixação de um campo vetorial escolhido.

Definição 2.2.10 (Produto interior). *Sejam X um campo vetorial suave em uma variedade M e $\omega \in \Omega^k(M)$. Definimos o produto interior de ω em X por*

$$\iota_X \omega(X_2, \dots, X_k) = \omega(X, X_2, \dots, X_k),$$

sendo X_2, \dots, X_k campos vetoriais suaves em M .

As duas operações se relacionam através da **fórmula de homotopia** (ou **mágica**) de **Cartan**.

Teorema 2.2.1. (*TU, 2010*, pg. 230) *Sejam X um campo vetorial suave em uma variedade M e $\omega \in \Omega^k(M)$. Então:*

$$\mathcal{L}_X \omega = \iota_X(d\omega) + d(\iota_X \omega).$$

Esta fórmula é um jeito prático de verificar se um fluxo dentro de um espaço conserva, em algum sentido, uma estrutura definida por uma forma diferencial sobre o espaço. Isso será visto mais adiante.

Por fim, a integração de k -formas diferenciais é fundamental para um entendimento mais profundo da relevância de aplicações simpléticas. Porém, uma explanação rigorosa exige conceitos de variedades diferenciáveis que são demasiado extensos para o escopo deste trabalho. Para mais detalhes, ver *TU, 2010* e *ARNOLD, 2013*.

De maneira resumida, a definição de integração sobre formas diferenciais em \mathbb{R}^n é intuitiva: se $\omega = f dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k} \in \Omega^k(U)$ e $R \subseteq U$, então:

$$\int_R \omega = \int_R f dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k} := \int_R f dx_{i_1} \dots dx_{i_k}.$$

Para integrar sobre uma variedade n -dimensional M , a decomponemos em estruturas menores chamadas *células* e *cadeias*.

Definição 2.2.11 (Células e Cadeias). *Uma **célula** k -dimensional em uma variedade M é uma tripla $\sigma = (D, f, Or)$, onde D é um poliedro convexo $D \subseteq \mathbb{R}^k$, $f : D \rightarrow M$ é uma aplicação diferenciável e Or é uma orientação em \mathbb{R}^k . Uma **cadeia** k -dimensional em M é um conjunto finito de células k -dimensionais $\sigma_1, \dots, \sigma_k$ de M e **multiplicadores** inteiros m_1, \dots, m_r , sendo denotada por:*

$$c_k = \sum_{i=1}^k m_i \sigma_i.$$

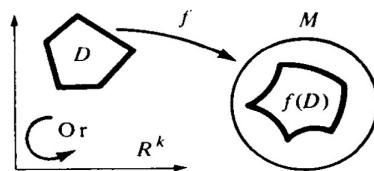


Figura 2.1: Representação de um poliedro singular k -dimensional (*ARNOLD, 2013*, Figura 150, pg. 184)

Definição 2.2.12. A integral de uma k -forma $\omega \in \Omega^k(M)$ sobre uma célula $\sigma = (D, f, Or)$ é dada por:

$$\int_{\sigma} \omega := \int_D f^* \omega.$$

Ademais, se $c_k = \sum m_i \sigma_i$ é uma k -cadeia em M , então:

$$\int_{c_k} \omega = \sum m_i \int_{\sigma_i} \omega.$$

Com a integração de formas sobre cadeias definida, é possível estender os teoremas integrais do cálculo vetorial para teoremas de integração de formas diferenciais sobre variedades. O mais geral deles é o *Teorema de Stokes Generalizado*.

Teorema 2.2.2 (Teorema de Stokes Generalizado). (*ARNOLD, 2013*, pgs. 192–193) Sejam c uma k -cadeia em M e ∂c o seu bordo. Para ω uma $(k-1)$ -forma em M , tem-se:

$$\int_c d\omega = \int_{\partial c} \omega.$$

A intuição por trás do teorema generalizado segue a mesma do teorema tradicional do cálculo vetorial: integrar o diferencial de um operador em um espaço é o mesmo que integrar o operador no bordo desse espaço.

Duas implicações imediatas do Teorema Generalizado vem da integração sobre formas fechadas e sobre formas exatas.

Corolário 2.2.2.1. Se $\omega \in \Omega^k(M)$ é fechada, então $\int_{\partial c} \omega = 0$.

Corolário 2.2.2.2. Se $\eta \in \Omega^k(M)$ é exata, então $\int_{\partial c} \eta = 0$.

Um último conceito utilizado em mecânica hamiltoniana é o de *invariante integral*.

Definição 2.2.13. Uma k -forma diferencial ω é dita um **invariante integral** de uma aplicação diferenciável $g : M \rightarrow M$ se para qualquer k -cadeia c tem-se:

$$\int_{gc} \omega = \int_c \omega.$$

2.2.2 Espaços vetoriais simpléticos

Iniciando o percurso na geometria simplética, trataremos de espaços vetoriais simpléticos, pois a extensão para outros espaços será mais simples. Seja V um espaço vetorial m -dimensional sobre \mathbb{R} e $\Omega \in \Lambda^2(V)$ uma 2-forma.

Teorema 2.2.3. (*SILVA, 2001*) Existem vetores $u_1, \dots, u_k, e_1, \dots, e_n, f_1, \dots, f_n$ que formam uma

base de V tais que

$$\begin{aligned}\Omega(\mathbf{u}_i, \mathbf{v}) &= 0, & \forall i, \forall v \in V, \\ \Omega(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) &= 0 = \Omega(\mathbf{f}_i, \mathbf{f}_j), & \forall i, j, \\ \Omega(\mathbf{e}_i, \mathbf{f}_j) &= \delta_{ij}, & \forall i, j,\end{aligned}$$

onde para $U = \{\mathbf{u} \in V \mid \Omega(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = 0, \forall \mathbf{v} \in V\}$ tem-se $k = \dim U$, e $2n + k = \dim V$.

Observação 2.2.1. Em notação matricial com respeito a essa base, podemos escrever:

$$\Omega(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{u}^t \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Omega \end{bmatrix} \mathbf{v},$$

onde $\Omega = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$ é a matriz simplética apresentada anteriormente.

Definição 2.2.14. A aplicação $\tilde{\Omega} : V \rightarrow V^*$ é a 1-forma definida por $\tilde{\Omega}(\mathbf{v})(\mathbf{u}) = \Omega(\mathbf{v}, \mathbf{u})$.

Definição 2.2.15. Dizemos que uma 2-forma geral Ω é **simplética** (ou **não degenerada**) se $\tilde{\Omega}$ é bijetiva, i.e., $\ker \tilde{\Omega} = \{0\}$. A aplicação Ω então é denominada como uma **estrutura simplética linear** sobre V , e (V, Ω) é chamado um **espaço vetorial simplético**.

Observação 2.2.2. Veja que $\ker \tilde{\Omega} = U$, então quando $\tilde{\Omega}$ é bijetiva, $\dim U = k = 0$, logo $\dim V = 2n$, portanto V sempre tem dimensão par. Além disso, pelo teorema 2.2.3, um espaço vetorial simplético (V, Ω) tem base $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n, \mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_n$ satisfazendo

$$\Omega(\mathbf{e}_i, \mathbf{f}_j) = \delta_{ij}, \quad \Omega(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = 0 = \Omega(\mathbf{f}_i, \mathbf{f}_j).$$

Por fim, a notação matricial fica reduzida:

$$\Omega(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{u}^t \Omega \mathbf{v}.$$

Diante de uma estrutura sobre um espaço vetorial, cabe perguntar que tipo de funções preservam tal estrutura. Estas funções são chamadas de **simplectomorfismos**.

Definição 2.2.16. Um **simplectomorfismo** φ entre dois espaços vetoriais simpléticos (V, Ω) e (V', Ω') é um isomorfismo linear $\varphi : V \xrightarrow{\sim} V'$ tal que

$$\varphi^* \Omega' = \Omega,$$

onde $(\varphi^* \Omega')(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \Omega'(\varphi(\mathbf{u}), \varphi(\mathbf{v}))$. Se um simplectomorfismo existe, (V, Ω) e (V', Ω') são ditos **simplectomorfos**.

Ser **simplectomorfo** é uma relação de equivalência no conjunto de todos os espaços vetoriais de mesma dimensão par. Isso vai além, pois podemos definir um **protótipo de espaço vetorial simplético** $(\mathbb{R}^{2n}, \Omega_0)$ tal que Ω_0 tem a base

$$\mathbf{e}_i = (\delta_{i,j})_{j=1, \dots, 2n}, \quad \mathbf{f}_i = (\delta_{n+i,j})_{j=1, \dots, 2n}, \quad i = 1, \dots, n,$$

e do teorema 2.2.3 decorre que qualquer espaço vetorial simplético (V, Ω) de dimensão $2n$

é simplectomorfo ao espaço $(\mathbb{R}^{2n}, \Omega_0)$. Então, ter a mesma dimensão par positiva também classifica classes de equivalência para a relação de ser simplectomorfo, de forma que todos os espaços simpléticos de mesma dimensão são simplectomorfos (SILVA, 2001, pg. 6).

2.2.3 Variedades simpléticas

Tomando uma variedade M e um ponto $p \in M$, o espaço tangente $T_p M$ é um espaço vetorial. Uma vez que seja possível construir uma base simplética para uma estrutura ω em todo o fibrado tangente TM , (TM, ω) é um espaço vetorial simplético, e dizemos que M admite uma **estrutura quase-simplética**.

É necessária uma restrição a mais para que ω seja uma estrutura simplética sobre M : ω deve ser fechado. Nesse caso, ω é dito uma **forma diferencial simplética** (ou simplesmente **forma simplética**) e com isso, podemos definir variedades simpléticas.

Definição 2.2.17. *Uma variedade simplética é um par (M, ω) , onde M é uma variedade e ω é uma forma simplética.*

Também é possível estender o conceito de *simplectomorfismo* através de *pullbacks*.

Definição 2.2.18 (Simplectomorfismo). *Sejam (M_1, ω_1) e (M_2, ω_2) variedades simpléticas e $\varphi : M_1 \rightarrow M_2$ um difeomorfismo. Dizemos que φ é um **simplectomorfismo** se $\varphi^* \omega_2 = \omega_1$, onde φ^* é o operador de **pullback**:*

$$(\varphi^* \omega_2)_p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\omega_2)_{\varphi(p)}(d\varphi_p(\mathbf{u}), d\varphi_p(\mathbf{v})),$$

para cada $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in T_p M_1$, para cada $p \in M_1$.

Uma implicação imediata da definição de simplectomorfismo é a invariância do volume.

Teorema 2.2.4. *Se $g : M \rightarrow M$ é uma aplicação diferenciável, então g é um simplectomorfismo se e somente se a forma simplética ω é um invariante integral de g .*

Demonstração. Para a ida (\Rightarrow), veja que para uma 2-cadeia c tem-se:

$$\int_{gc} \omega = \int_c g^* \omega = \int_c \omega.$$

Para a volta (\Leftarrow), temos que:

$$\int_{gc} \omega = \int_c \omega \implies \int_c g^* \omega = \int_c \omega \quad \therefore \quad g^* \omega = \omega.$$

□

Uma vez que ω é uma 2-forma simplética, ω é o diferencial de uma 1-forma, e assim é definida pelo produto exterior de 1-formas. Isso significa que ω corresponde a um volume em seu domínio, então um simplectomorfismo é um difeomorfismo que conserva um volume em sua trajetória.

O conceito de espaços **simplectomorfos** é idêntico ao caso linear. Ainda, se tomamos \mathbb{R}^{2n} com coordenadas $x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n$, a forma

$$\omega_0 = \sum_{i=1}^n dx_i \wedge dy_i$$

é simplética e logo $(\mathbb{R}^{2n}, \omega_0)$ é um espaço simplético, e da mesma forma que toda variedade de dimensão n é localmente “parecida” com \mathbb{R}^n , toda $2n$ -variedade simplética é localmente “parecida” com $(\mathbb{R}^{2n}, \omega_0)$, no sentido de que toda variedade (M^{2n}, ω) é localmente simplectomorfa a $(\mathbb{R}^{2n}, \omega_0)$. Isso decorre do **teorema de Darboux** e foge do escopo deste trabalho, mas os detalhes podem ser encontrados em [SILVA, 2001](#), pg. 7.

Uma forma prática de caracterizar simplectomorfismos dentro de um mesmo espaço é através da fórmula mágica de Cartan, o teorema 2.2.1.

Teorema 2.2.5. *Sejam X um campo vetorial suave em uma variedade simplética (M, ω) , com fluxo associado φ_t para algum ponto $p \in M$. O fluxo φ_t é um simplectomorfismo se, e só se, $\mathcal{L}_X \omega = 0$.*

Demonstração. Pela definição 2.2.18, queremos provar que $\varphi_t^* \omega = \omega \Leftrightarrow \mathcal{L}_X \omega = 0$.

Para o lado (\Rightarrow) , se φ_t é um simplectomorfismo, tem-se por definição:

$$\mathcal{L}_X \omega = \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \varphi_t^* \omega = \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \omega = 0.$$

Já para (\Leftarrow) Uma vez que $\varphi_{s_1} \circ \varphi_{s_2} = \varphi_{s_1+s_2}$ (pela definição de fluxo), segue que

$$\varphi_\lambda^*(\mathcal{L}_X \omega) = \varphi_\lambda^* \left(\frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \varphi_t^* \omega \right) = \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \varphi_{t+\lambda}^* \omega = \frac{d}{dt} \Big|_{t=\lambda} \varphi_t \omega.$$

Por hipótese, temos que $\mathcal{L}_X \omega = 0$, então

$$\frac{d}{dt} \Big|_{t=\lambda} \varphi_t^* \omega = 0, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R},$$

o que significa que a aplicação $\mu(\lambda) = \varphi_\lambda^* \omega$ é constante. Veja que

$$\mu(0) = \varphi_0^* \omega = \omega \circ \varphi_0 = \omega \Rightarrow \varphi_t^* \omega = \omega.$$

□

Uma variedade simplética já conhecida neste momento é o *fibrado cotangente* T^*M . Para coordenadas locais (q, p) , tomamos uma 1-forma $\omega^1 = pdq$. A partir disso, uma 2-forma exata natural é $\omega^2 = d\omega^1 = dp \wedge dq$, e que por ser exata é fechada, e portanto simplética. A 2-forma ω^2 é dada por

$$\omega(f, g) = (dq \wedge dp)(f, g) = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} = \nabla^t f \Omega \nabla g,$$

onde Ω é a matriz simplética. Com isso, agora é possível estudar os campos hamiltonianos e sua relação com a geometria simplética.

2.2.4 Campos hamiltonianos

Os campos hamiltonianos são um tipo de campo simplético com uma propriedade a mais: a 2-forma é exata.

Definição 2.2.19 (Campo hamiltoniano). *Sejam X um espaço vetorial em uma variedade simplética (M, ω) e $H : M \rightarrow \mathbb{R}$ uma função suave. Dizemos que X é um **campo hamiltoniano** se $\iota_X \omega = dH$ é exato. O campo X é denotado por X_H devido a sua relação com H e dizemos que (M, ω, H) é um **sistema hamiltoniano**.*

Conforme o teorema 2.2.5, é fácil ver que todo campo hamiltoniano é necessariamente simplético, ou seja, o fluxo associado é um simplectomorfismo.

Corolário 2.2.5.1. *Todo campo hamiltoniano X_H é simplético.*

Demonstração. Pela fórmula de Cartan, temos que

$$\mathcal{L}_{X_H} \omega = \iota_{X_H} (d\omega) + d(\iota_{X_H} \omega) = 0 + d(dH) = 0,$$

pois $d\omega = 0$ (ω é simplético) e $\iota_{X_H} \omega = dH$. Pelo teorema 2.2.5, o fluxo φ_t associado ao campo hamiltoniano X_H é um simplectomorfismo. \square

Uma vez que o fluxo hamiltoniano é simplético, vale o teorema 2.2.4, então há também a conservação do volume. Isso é uma forma simplética de expressar o que já havia sido visto pelo teorema 2.1.6, também chamado de **teorema de Liouville**. Essa conservação está ligada diretamente com a existência de integrais primeiras, e em particular H é uma integral primeira para o fluxo φ_t .

Proposição 2.2.1. *A função H é uma integral primeira do fluxo hamiltoniano φ_t .*

Demonstração. Pela definição de dH , temos que:

$$dH(X_H) = \iota_{X_H} \omega(X_H) = \omega(X_H, X_H) = 0.$$

\square

De fato, toda integral primeira do fluxo hamiltoniano terá campo tangente anulado por dH .

Proposição 2.2.2. *Seja f uma função em M . f é uma integral primeira para o fluxo hamiltoniano φ_t se, e somente se, $dH(X_f) = 0$, onde $X_f = df$.*

Demonstração. Se f é uma integral primeira para φ_t , então

$$\frac{d}{dt} f(\varphi_t) = X_f \frac{d}{dt} \varphi_t = dH(X_f) = 0.$$

A volta é análoga. \square

Ademais, um operador bastante presente na mecânica hamiltoniana é o *colchete de Poisson*.

Definição 2.2.20. *Seja (M, ω) uma variedade simplética. O colchete de Poisson $\{\cdot, \cdot\}$ é um operador bilinear definido por*

$$\{f, g\} = -\iota_{X_f} \iota_{X_g} \omega = \omega(X_f, X_g) = (\nabla f)^t \Omega (\nabla g).$$

Com essa notação, é possível reescrever o resultado anterior sobre integrais primeiras: uma função f é uma integral primeira para o fluxo hamiltoniano com função hamiltoniana H se, e só se, $\{H, f\} = 0$. Além disso, se f é uma função no espaço de fases, então

$$\frac{d}{dt} f = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}.$$

Por fim, por maior que seja a diversidade de funções hamiltonianas, as que interessam neste trabalho são as cujo campo X_H é dado por

$$X_H = \Omega dH,$$

onde Ω é a matriz simplética, e o espaço em questão é (T^*M, ω^2) , com coordenadas (q, p) e 2-forma associada. Isso significa, em particular, que

$$\{f, g\} = Df^t \Omega Dg = \sum_i \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i}.$$

Com essa notação, também é possível reescrever as equações de Hamilton (conforme teorema 2.1.5):

$$\begin{cases} \dot{q}(t) = \{q, H\}, \\ \dot{p}(t) = \{p, H\}, \end{cases} \quad \text{ou} \quad \dot{\varphi}(t) = \{\varphi, H\}, \quad (2.11)$$

onde $\varphi(t) = (q(t), p(t))$ é o fluxo hamiltoniano. Além disso, qualquer sistema de *coordenadas canônicas* pode ser identificado através do colchete de Poisson: se (u, v) é um par de coordenadas canônicas então

$$\{u_a, u_b\} = 0, \quad \{v_a, v_b\} = 0, \quad \{u_a, v_b\} = \delta_a^b. \quad (2.12)$$

Observe que estas são as mesmas propriedades esperadas para uma *base* de um espaço vetorial simplético, como no teorema 2.2.3.

2.2.5 Transformações canônicas

Nesta última seção, é melhor explorado o significado do teorema 2.2.4. Os simplectomorfismos, caracterizados por terem a forma simplética como invariante integral, são também chamados de *transformações canônicas*. A preservação das equações de Hamilton é uma consequência sob a aplicação de transformações canônicas, o que às vezes é mais prático de se testar do que a teoria simplética vista. Nesta seção, considere uma aplicação

$z \mapsto w$, onde $z = (q, p)$ e $w = (Q, P)$, e dois campos hamiltonianos V_H e V_K associados de maneira respectiva.

Definição 2.2.21 (Transformação canônica). *Dizemos que a transformação $z \mapsto w$ é canônica se $H(z) = K(z'(z))$ e se preserva as equações de Hamilton, isto é:*

$$\dot{z} = \Omega \nabla_z H \longrightarrow \dot{z}' = \Omega \nabla_{z'} K.$$

A partir da definição de transformação canônica, é possível deduzir uma forma prática de validar a simpleticidade de aplicações.

Teorema 2.2.6. *Uma aplicação $z \mapsto w$ é canônica se, e só se, sua matriz jacobiana*

$$J = \frac{\partial(Q, P)}{\partial(q, p)}$$

atende a seguinte condição:

$$J \Omega J^t = \Omega. \quad (2.13)$$

Demonstração. Uma vez que $H(z) = K(w(z))$, então $\nabla_z H = J^t \nabla_w K$. Dessa forma,

$$\dot{w} = J \dot{z} = J(\Omega \nabla_z H) = J \Omega J^t \nabla_w K = \Omega \nabla_w K,$$

sendo a última passagem por definição. Assim, a equação 2.13 é necessária para que a aplicação seja canônica e vice-versa. É fácil ver que uma vez que esteja atendida, também é suficiente para garantir que $z \mapsto w$ se encaixa na definição de aplicação canônica. \square

Corolário 2.2.6.1. *Uma formulação equivalente a (2.13) é:*

$$J \Omega J^t \Omega^t = I. \quad (2.14)$$

Demonstração. A matriz Ω é ortonormal, então $\Omega^{-1} = \Omega^t$. \square

Pelo teorema 2.2.6, a aplicação ser canônica equivale a preservar o colchete de Poisson: para qualquer u, v , temos

$$\{u, v\}_z = (\nabla_z u)^t \Omega (\nabla_z v) = (\nabla_w u)^t J \Omega J^t (\nabla_w v) = (\nabla_w u)^t \Omega (\nabla_w v) = \{u, v\}_w.$$

Mais ainda. A conservação do Parêntese de Poisson significa que a própria forma ω do sistema hamiltoniano está sendo conservada. Pela definição (2.2.18), as transformações canônicas são simplectomorfismos.

Com essa nova notação e novos conceitos, as equações de Hamilton no teorema 2.1.5 ganham uma base teórica mais sólida, se definindo sobre espaços com estruturas bem definidas e específicas o suficiente para fornecer resultados numéricos; observar a variação numérica de um valor que deveria ser conservado teoricamente durante uma trajetória fornece informações sobre a razoabilidade de uma simulação, por exemplo. Isso será visto com mais detalhes no capítulo 4.

Capítulo 3

O Problema de N-Corpos Gravitacional

O Problema de N-Corpos Gravitacional (PNCG) é um sistema mecânico descrito por um conjunto de equações diferenciais ordinárias de segunda ordem, com existência e unicidade de solução garantidas localmente pelo Teorema de Existência de Unicidade. O PNCG possui algumas propriedades inerentes garantidas por seu potencial homogêneo, como a presença de uma integral primeira escalar e outras três vetoriais, a semelhança de soluções pelo redimensionamento anisotrópico, medidas de distanciamento e evolução da expansão.

Este capítulo é dedicado ao estudo do PNCG e de suas propriedades básicas citadas, sem, no entanto, se focar em questões demasiado específicas, como soluções analíticas para problemas de dois ou três corpos. São apresentados conceitos e propriedades gerais, além de uma introdução à Dinâmica de Formas sob o *toy-model* de N-corpos.

3.1 Enunciado

Considere um conjunto de N partículas dispostas no vácuo tridimensional (\mathbb{R}^3 , digamos), cada uma com massa m_a , posição \mathbf{q}_a e velocidade \mathbf{v}_a , para $a = 1, 2, \dots, N$. A *Lei da Gravitação Universal de Newton* fornece a seguinte função potencial suave:

$$V = - \sum_{a < b} G \frac{m_a m_b}{r_{ab}}, \quad r_{ab} = \|\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b\|, \quad (3.1)$$

onde G é a *constante de gravitação universal*.

A partir de V , define-se um campo gradiente $\mathbf{F} = -\nabla V$ que gera as seguintes equações de movimento, conforme (2.1):

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}}_a = \mathbf{v}_a, \\ \dot{\mathbf{v}}_a = \frac{1}{m_a} \mathbf{F}_a = \sum_{b \neq a}^N G m_b \frac{\mathbf{q}_b - \mathbf{q}_a}{r_{ab}^3}, \end{cases} \quad \forall a = 1, 2, \dots, N. \quad (3.2)$$

A existência e a unicidade das soluções das equações (3.2) munidas de um conjunto de valores iniciais é garantida localmente em $(\mathbb{R}^3/\Delta) \times \mathbb{R}^3$ pelo *Teorema de Existência e Unicidade*, cuja demonstração pode ser encontrada em (VOLCHAN, 2007, pgs. 34–36). Aqui, Δ é o *conjunto singular*, dado por

$$\Delta = \bigcup_{1 \leq i < j \leq N} \{(q_1, \dots, q_N) \in \mathbb{R}^{3N} : q_i = q_j\}.$$

Observe que também é possível representar o problema em termos de posições e momentos conjungados, tomando $p_a = m_a q_a, \forall a$ e escrevendo as equações de Hamilton:

$$\begin{cases} \dot{q}_a = \frac{\partial H}{\partial p_a} = -p_a/m_a, \\ \dot{p}_a = -\frac{\partial H}{\partial q_a} = \sum_{b \neq a}^N G m_a m_b \frac{q_b - q_a}{r_{ab}^3}, \end{cases} \quad (3.3)$$

onde como função Hamiltoniana toma-se a energia total:

$$H(q, p) = T(p) + V(q).$$

3.2 Integrais primeiras

O PNCG tridimensional possui dez integrais primeiras, cada uma correspondente a uma simetria dentro do sistema.

Teorema 3.2.1. *O PNCG possui como integrais primeiras não-triviais a energia total E (correspondente à invariância temporal), momento angular total \mathbf{J} (correspondente à invariância sob rotações), o momento linear total \mathbf{P} e a trajetória $\mathbf{G}(t)$ do centro de massas \mathbf{q}_{cm} (correspondentes à invariância sob translações).*

Demonstração. Para a energia total, a demonstração já foi feita no Teorema 2.1.1.

Para o momento linear total $\mathbf{P} = \sum_{a=1}^N \mathbf{p}_a$, basta aplicar a definição 2.1.4:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_{a=1}^N \frac{d\mathbf{p}_a}{dt} = \sum_{a=1}^N \mathbf{F}_a = \mathbf{0},$$

pois o sistema é fechado.

Para a trajetória do centro de massas, temos:

$$\mathbf{G}(t) = M\mathbf{q}_{cm} - t\mathbf{P} \Rightarrow \frac{d\mathbf{G}}{dt} = M\frac{\mathbf{P}}{M} - \mathbf{P} = \mathbf{0}. \quad (3.4)$$

No caso em que $\mathbf{P} = \mathbf{0}$, a conservação de $\mathbf{G}(t)$ equivale à conservação de \mathbf{q}_{cm} .

Por fim, o momento angular total:

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \sum_{a=1}^N \mathbf{q}_a \times \dot{\mathbf{p}}_a = \sum_{a=1}^N \sum_{b \neq a}^N \frac{Gm_a m_b}{r_{ab}^3} \mathbf{q}_a \times \mathbf{q}_b = \mathbf{0}. \quad (3.5)$$

□

O fato de o centro de massas do Problema ter uma rota linear e seu momento generalizado (\mathbf{P}) ser uma integral primeira significa que se o centro de massas partir da origem e o momento linear total for nulo, o sistema não deverá se mover. Isso é particularmente interessante para simulações numéricas, mas mesmo analiticamente ainda é uma propriedade que facilita o estudo.

3.3 Questões de escala

Nas simulações numéricas diretas de gravitação (ou seja, integrando diretamente as equações de movimento do PNCG), uma questão fundamental que aparece é a da escolha de unidades de medida padrão, de modo a garantir que diferentes simulações possam ser comparáveis. Alguns padrões foram definidos por [AARSETH, 2003](#) e são aplicados nos códigos NBODY ([AARSETH, 2024](#)), e serão vistos com mais cuidados na seção de simulação. Para fins teóricos, a princípio, é possível obter algumas relações acerca da medida dos sistemas de partículas e das órbitas.

Para começar, para cada problema de valor inicial do PNCG, é possível obter uma família infinita de órbitas idênticas a menos de um fator de escala anisotrópico. Isso significa que através de uma aplicação linear contínua, soluções são enviadas em soluções.

Teorema 3.3.1 (Similaridade dinâmica). *As equações de movimento do PNCG satisfazem a similaridade dinâmica: se $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ são órbitas do problema de N-corpos, o redimensionamento anisotrópico*

$$\tilde{\mathbf{q}}(\tilde{t}) = \alpha \mathbf{q}(t), \quad \tilde{t} = \alpha^{3/2} t, \quad \alpha > 0$$

das distâncias e do tempo newtoniano leva soluções $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ em soluções $(\tilde{\mathbf{q}}(\tilde{t}), \tilde{\mathbf{p}}(\tilde{t}))$.

Demonstração. Considere um potencial geral homogêneo de grau k e a mudança de coordenadas $\tilde{\mathbf{q}}_a = \alpha \mathbf{q}_a$, que implica em $\tilde{t} = \beta t$, para algum β e então $\tilde{\mathbf{p}}_a = \alpha \mathbf{p}_a / \beta$. Com as novas coordenadas, temos a energia total

$$H(\beta t, \alpha \mathbf{q}, \alpha \mathbf{p} / \beta) = \frac{\alpha^2}{\beta^2} T(\mathbf{p}) + \alpha^k V(\mathbf{q}).$$

Os sistemas são similarmente dinâmicos se β for tal que podemos escrever $H(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}}) = \alpha^k H(t, \mathbf{q}, \mathbf{p})$ (pois soluções são enviadas em soluções pelo redimensionamento). Decorre então que

$$\alpha^k = \frac{\alpha^2}{\beta^2} \Rightarrow \beta = \alpha^{1-k/2}.$$

No PNCG temos que $k = -1$, e portanto $\tilde{\mathbf{q}}_a = \alpha \mathbf{q}_a$, $\tilde{\mathbf{p}}_a = \alpha^{-1/2} \mathbf{p}_a$ e $\tilde{t} = \alpha^{3/2} t$. □

Observe que num problema de 2 corpos no qual um se encontra fixado e o outro sob uma órbita elíptica, se tomamos a distância ℓ entre os corpos e aplicamos a similaridade dinâmica obtemos:

$$\tilde{\ell} = \alpha \ell \Rightarrow \tilde{\ell}/\ell = \alpha.$$

Isso significa que

$$\tilde{t} = \alpha^{3/2} t \Rightarrow \left(\frac{\tilde{t}}{t}\right)^2 = \left(\frac{\tilde{\ell}}{\ell}\right)^3,$$

o que é a chamada *Terceira Lei de Kepler*. O que o teorema 3.3.1 faz, dessa forma, é mostrar que é possível ignorar as escalas, em certo sentido, não apenas para $N = 2$ mas para qualquer valor de N . Isso é explorado na seção 3.6.

Além de redimensionar as órbitas, é particularmente interessante medir sua distância em função do tempo tendo em conta que aproximações tendem a gerar instabilidades numéricas. Uma medida para isso é dada pelo *momento de inércia do centro de massas*.

Definição 3.3.1 (Momento de inércia). *O momento de inércia do centro de massas do PNCG é dado por:*

$$I = \sum_{a=1}^N m_a \|\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_{cm}\|^2 = \frac{1}{M} \sum_{a < b} m_a m_b \|\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b\|^2 = R^2.$$

O observável I pode ser interpretado como um tipo de *variância* (no sentido estatístico) do sistema, uma vez que mede a dispersão das partículas em relação a um referencial (nesse caso, o centro de massas), sendo R , por sua vez, o *desvio padrão*. Na perspectiva do sistema como um todo, I mede a dilatação espacial. Sua taxa de variação em relação ao tempo fornece a quantidade de movimento (ou *momento*, conforme nomeado por BARBOUR, 2003) da dilatação do sistema.

Definição 3.3.2 (Momento de dilatação). *O momento de dilatação do PNCG é proporcional à derivada do momento de inércia:*

$$D := \frac{1}{2} \frac{dI}{dt} = \sum_{a=1}^N \mathbf{q}_a \cdot \mathbf{p}_a.$$

A variação do momento de dilatação oferece uma relação fundamental do PNCG, chamada *identidade de Lagrange-Jacobi*.

Teorema 3.3.2 (Identidade de Lagrange-Jacobi). *A segunda derivada do momento de inércia do PNCG é dada por:*

$$\ddot{I} = 4E - 2V. \quad (3.6)$$

No geral, se V é homogêneo de grau k , então

$$\ddot{I} = 4E - 2(2 + k)V. \quad (3.7)$$

Lema 3.3.3 (Teorema de Euler para funções homogêneas). *Considere uma função f homogênea de grau k em um aberto $A \subseteq \mathbb{R}^n$. Então $kf(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \nabla f(\mathbf{x}) \rangle$, para todo $\mathbf{x} \in A$.*

Demonstração. Como f é homogênea de grau k , então

$$f(\lambda \mathbf{x}) = \lambda^k f(\mathbf{x}).$$

Tomando $\mathbf{u} = \lambda \mathbf{x}$ e derivando dos dois lados em relação a λ , temos:

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial u_i} \frac{du_i}{d\lambda} = \sum_{i=1}^n x_i \frac{\partial f}{\partial u_i} = k \lambda^{k-1} f(\mathbf{x}).$$

Em particular, tomando $\lambda = 1$ (pois λ é qualquer), tem-se:

$$k f(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \nabla f(\mathbf{x}) \rangle.$$

□

Demonstração. (do teorema). Uma vez que $\dot{I} = 2D$, basta derivar novamente:

$$\ddot{I}(t) = 2 \frac{dD}{dt} = 2 \sum_{a=1}^N \dot{\mathbf{q}}_a \cdot \mathbf{p}_a + 2 \sum_{a=1}^N \mathbf{q}_a \cdot \dot{\mathbf{p}}_a = 4T - 2 \sum_{a=1}^N \langle \mathbf{q}_a, \nabla_{q_a} V \rangle.$$

Se V é homogêneo de grau k , então podemos aplicar o lema 3.3.3:

$$\ddot{I}(t) = 4T - 2kV = 4E - 2(2+k)V,$$

sendo $k = -1$ o caso newtoniano. □

A Identidade de Lagrange-Jacobi é útil uma vez que $-2V$ é um valor necessariamente positivo, o que significa que a dilatação do sistema de partículas depende fortemente da energia total do sistema, que é constante. Escolher valores iniciais de modo a obter $E \geq 0$, por exemplo, implica que $\ddot{I}(t) > 0$, então $I(t)$ assume um formato côncavo para cima (com um mínimo global), e portanto o sistema possui um momento de contração máxima seguido de uma expansão indefinida, tanto do ponto de vista em que o tempo t cresce quanto para quando t decresce. Isso, novamente, é utilizado pela Dinâmica de Formas e é explorado com mais detalhes na seção 3.6.

Uma outra relação importante no PNCG fornece estimativas para as separações máximas e mínimas dos corpos a partir de R e de V , respectivamente.

Teorema 3.3.4. *Sejam $q_{min} = \min_{j \neq k} q_{jk}$ e $q_{max} = \max_{j \neq k} q_{jk}$ os distanciamentos mínimo e máximo entre as partículas, respectivamente, $m_0 = \min_a m_a$ e $M = \sum_{a=1}^N m_a$. Tem-se as seguintes relações:*

$$R \sqrt{\frac{2}{M}} \leq q_{max} \leq \frac{R \sqrt{M}}{m_0}, \quad -\frac{Gm_0^2}{V} \leq q_{min} \leq -\frac{GM^2}{2V}.$$

Demonstração. Começando por q_{max} , podemos escrever que

$$\frac{m_0^2}{2M} q_{max}^2 \leq \frac{m_0^2}{2M} \sum_{a < b} r_{ab}^2 \leq \frac{1}{2} I, \quad (3.8)$$

e, analogamente:

$$\frac{1}{2}I \leq \left(\frac{1}{2M} \sum_{a < b} m_a m_b \right) q_{max}^2 = \left(\frac{1}{4M} \sum_{b=1}^N \sum_{a=1}^N m_a m_b \right) q_{max}^2 = \frac{M}{4} q_{max}^2. \quad (3.9)$$

Isso significa que

$$\frac{m_0^2}{M} q_{max}^2 \leq I \leq \frac{M}{2} q_{max}^2 \Rightarrow R \sqrt{\frac{2}{M}} \leq q_{max} \leq \frac{R \sqrt{M}}{m_0}. \quad (3.10)$$

Da mesma forma, como $\frac{1}{2}M^2 \geq \sum_{a < b} m_a m_b$, temos que:

$$-V \leq \frac{G}{q_{min}} \sum_{a < b} m_a m_b \leq \frac{G}{2q_{min}} \sum_{b=1}^N \sum_{a=1}^N m_a m_b = \frac{GM^2}{2q_{min}}, \quad (3.11)$$

e, ademais, vale que

$$-V \geq G \frac{m_a m_b}{r_{ab}} \geq \frac{Gm_0^2}{r_{ab}}, \quad \forall 1 \leq a, b \leq N, \quad (3.12)$$

e como para algum a e b vale que $r_{ab} = q_{min}$, temos que

$$-V \geq \frac{Gm_0^2}{q_{min}}. \quad (3.13)$$

Obtemos a relação:

$$-\frac{GM^2}{2q_{min}} \leq V \leq -\frac{Gm_0^2}{q_{min}}, \quad (3.14)$$

o que oferece a relação buscada (pois $V < 0$):

$$-\frac{Gm_0^2}{V} \leq q_{min} \leq -\frac{GM^2}{2V}. \quad (3.15)$$

□

Também é possível limitar o comportamento do momento angular usando a relação de Lagrange-Jacobi.

Teorema 3.3.5 (Desigualdade de Sundman). *Considere o momento angular total \mathbf{J} , o momento de inércia I e a energia total H . Então*

$$\|\mathbf{J}\|^2 \leq I(\ddot{I} - 2H).$$

Demonstração. Começamos pela desigualdade de Cauchy-Schwarz:

$$\begin{aligned}
 \|\mathbf{J}\| &\leq \sum_{a=1}^N m_a \|\mathbf{q}_a \times \mathbf{p}_a m_a^{-1}\| \leq \sum_{a=1}^N m_a \|\mathbf{q}_a\| \|\mathbf{p}_a m_a^{-1}\| \\
 &= \sum_{a=1}^N (\sqrt{m_a} \|\mathbf{q}_a\|) (\sqrt{m_a} \|\mathbf{p}_a m_a^{-1}\|) \leq \sqrt{\sum_{a=1}^N m_a \|\mathbf{q}_a\|^2} \sqrt{\sum_{a=1}^N m_a^{-1} \|\mathbf{p}_a\|^2} \\
 &= \sqrt{2IT}.
 \end{aligned}$$

Pela relação de Lagrange-Jacobi, $2T = \ddot{I} - 2H$, então obtém-se o esperado. \square

3.4 Colisões

O intervalo maximal de soluções do PNCG não necessariamente se estende para toda a reta, pois existem circunstâncias em que a solução é interrompida abruptamente. Um exemplo de caso é quando duas trajetórias se interceptam em um dado instante comum, o que fisicamente significa que dois corpos colidiram.

Lidar com essas situações é também necessário do ponto de vista numérico, pois muitas vezes não se pretende encerrar uma simulação quando dois corpos colidirem. Além disso, mesmo aproximações muito intensas são capazes de instabilizar numericamente os métodos devido aos erros de ponto flutuante, então, ainda que duas trajetórias não colidam exatamente, pode ser numericamente interessante lidar com a aproximação supondo que houve colisão.

De fato, tais situações de aproximação são de maior interesse, pois é conhecido que o conjunto de condições iniciais que leva a uma colisão em tempo finito tem medida de Lebesgue zero ([SAARI, 1971](#)). Então, embora isso não implique na impossibilidade de que ocorram, colisões *verdadeiras* são raras.

Existem algumas formas de tratar esses casos, como por meio de regularizações ou mesmo com amortecedores no potencial, como será discutido na seção 5.3. Uma possibilidade aqui proposta é a de adicionar colisões perfeitamente elásticas. As colisões perfeitamente elásticas (ou CPE) são aquelas em que não há deformação dos objetos e a energia cinética é conservada. Essa é uma possível vantagem sobre os outros métodos, uma vez que não compromete a estrutura simplética de sistemas hamiltonianos.

Uma abordagem consiste em definir um parâmetro de densidade ρ , e uma vez que cada corpo tem massa, a densidade definirá um volume. Na suposição de que os corpos são perfeitamente esféricos, tem-se o raio

$$r = \sqrt[3]{\frac{3m}{4\pi\rho}}. \quad (3.16)$$

Além disso, um critério para garantir que dois corpos próximos de massas m_1 e m_2 ,

posições \mathbf{q}_1 e \mathbf{q}_2 e velocidades \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 , estão em rota de colisão é verificar se

$$\langle \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1, \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1 \rangle \leq 0.$$

A dinâmica pós-colisão é definida da maneira que segue. Sejam as massas, posições e velocidades como anteriormente. Sejam também $\vec{\pi}$ o plano tangente de contato e \mathbf{N} o versor normal ao plano:

$$\mathbf{N} = \frac{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1}{\|\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1\|} = (n_1, n_2, n_3). \quad (3.17)$$

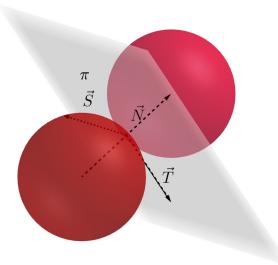


Figura 3.1: Colisão entre dois corpos, plano tangente π e versores.

Para obter os versores geradores do plano, basta tomar, por exemplo, os vetores

$$\mathbf{T} = \frac{(n_3, n_3, -n_1 - n_2)}{\|(n_3, n_3, -n_1 - n_2)\|}, \quad \mathbf{S} = \frac{\mathbf{N} \times \mathbf{T}}{\|\mathbf{N} \times \mathbf{T}\|},$$

como na figura 3.1. Observe que \mathbf{T} não é bem definido, uma vez que $n_1 = -n_2$ e $n_3 = 0$ gera $\mathbf{T} = \mathbf{0}$. Na ocorrência desse caso, uma solução possível é utilizar outro vetor \mathbf{T} :

$$\mathbf{T} = \frac{(-n_2, n_1, 0)}{\|(-n_2, n_1, 0)\|}.$$

Supondo que não ocorrem colisões reais, isto é, que $\mathbf{N} \neq \mathbf{0}$ (o que, numericamente, é uma suposição válida), definimos \mathbf{S} da mesma forma e o método que segue se mantém.

Com isso, as velocidades podem ser decompostas em relação ao plano tangente e em relação ao vetor normal:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &= \mathbf{v}_1^\pi + v_1 \mathbf{N}, \\ \mathbf{v}_2 &= \mathbf{v}_2^\pi + v_2 \mathbf{N}. \end{aligned}$$

Uma vez que o sistema não contém rotações individuais, em uma colisão não há forças atuando nas direções do plano tangente, então a única alteração se dá nas componentes normais. Sendo v'_1 e v'_2 as novas velocidades normais, a colisão ser perfeitamente elástica implica na conservação do momento linear total e da energia cinética:

$$\begin{cases} m_1 v_1 + m_2 v_2 = m_1 v'_1 + m_2 v'_2, \\ m_1 v_1^2 + m_2 v_2^2 = m_1 v'_1^2 + m_2 v'_2^2. \end{cases} \quad (3.18)$$

Do sistema de equações (3.18), decorre que

$$v'_1 = \frac{v_1(m_1 - m_2) + 2m_2v_2}{m_1 + m_2},$$

$$v'_2 = \frac{v_2(m_2 - m_1) + 2m_1v_1}{m_1 + m_2}.$$

Dessa forma, as novas velocidades após a colisão são:

$$v'_1 = v_1^\pi + v'_1 N,$$

$$v'_1 = v_1^\pi + v'_1 N.$$

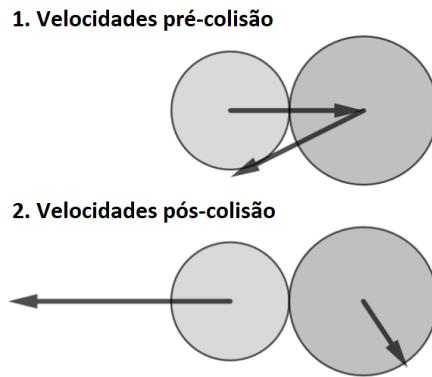


Figura 3.2: Exemplo de colisão. Os tamanhos diferentes indicam massas diferentes.

Na figura 3.2 tem-se um exemplo de colisão entre dois corpos com massas diferentes. Como esperado, um corpo de massa menor sai da colisão com mais velocidade (e com sentido oposto), enquanto um de massa maior sai com menos velocidade (e com componente normal também no sentido oposto).

3.5 Estabilidade

A principal motivação da última subseção foi obter uma forma conservativa de estender soluções do PNCG que são “interrompidas”. Essa interrupção é, no sentido matemático, uma singularidade na órbita, o que limita o intervalo maximal para um tempo finito. O caso mais simples de interrupção é justamente uma colisão entre dois ou mais corpos.

Definição 3.5.1 (Colisão). *Diz-se que ocorre uma colisão no instante t^* se cada $q_j(t)$ tem limite finito quando $t \rightarrow t^*$, no sentido de que para algum $i \neq k$, $q_i(t^*) = q_k(t^*)$. Se para todo $i, k = 1, 2, \dots, N$ tem-se que $q_i(t^*) = q_k(t^*)$, então tem-se um **colapso total**.*

Apesar de ser uma exceção, o colapso total ocorre em situações interessantes para este trabalho. Decorre do teorema 3.3.4 que se ele ocorre em algum instante $t = t^*$, então ele ocorre na origem. Para isso, basta ver pela definição 3.3.1 que $I(t^*) = 0$, então $q_{max} = 0$. Além disso, uma colisão total só ocorre em tempo finito.

Proposição 3.5.1. *Se ocorre o colapso total em $t = t^*$, então $t^* < +\infty$.*

Demonstração. Suponha que $t^* = +\infty$. Como o colapso total ocorre na origem,

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} V(\mathbf{q}(t)) = -\infty \Rightarrow \lim_{t \rightarrow +\infty} \ddot{I}(t) = +\infty$$

através da identidade de Lagrange-Jacobi. Assim, existe $t_1 > 0$ de modo que para todo $t > t_1$ vale que $\ddot{I}(t) \geq 1$. Então:

$$I(t) \geq \frac{1}{2}t^2 + c_1t + c_2, \Rightarrow \lim_{t \rightarrow +\infty} I(t) = +\infty,$$

o que é uma contradição. □

Outro ponto é que só ocorre o colapso total dentro de uma hipersuperfície específica do espaço de fases.

Teorema 3.5.1 (Sundman-Weierstrass). *Se ocorre o colapso total, então $\mathbf{J} = 0$.*

A demonstração pode ser encontrada em (VOLCHAN, 2007, pgs. 62–63). Um resultado importante também de Sundman é que se $\mathbf{J} \neq 0$, então não ocorrem colisões triplas. Na prática, através da regularização das colisões binárias, a solução de um problema com $\mathbf{J} \neq 0$ pode ter intervalo maximal estendido para toda a reta.

Nesse momento, qualquer definição de “estabilidade” das órbitas deve supor que não ocorre o colapso total, mas isso ainda não é suficiente. Um critério mais bem-definido proposto por Volchan é: para todo $i \neq j$ e todo $t \in \mathbb{R}$ e para uma constante $K > 0$,

1. $r_{ij} \neq 0$;
2. $r_{ij} \leq K$.

Isto é, o sistema não só não cai sobre si mesmo, como também se mantém confinado em um cilindro de raio K . No caso de $\mathbf{P} = 0$, o sistema se encontra parado, então a restrição corresponde a uma esfera de raio K . Sistemas periódicos, por exemplo, atendem a essa propriedade.

De forma geral, Jacobi propôs uma condição necessária (VOLCHAN, 2007, pg. 65).

Teorema 3.5.2 (Critério de estabilidade de Jacobi). *Uma condição necessária para que a solução seja estável é que a energia total seja negativa.*

Demonstração. Como comentado anteriormente, se a energia é não-negativa então I assume formato côncavo e é limitado inferiormente. Assim, $\lim_{t \rightarrow \infty} I(t) = +\infty$, então o tamanho do sistema não é limitado. □

Para $N = 2$, a condição é suficiente. Porém, isso não se estende para $N \geq 3$. Ainda assim, é possível obter outra condição necessária a partir da relação de Lagrange-Jacobi, ao que se denomina usualmente por **teorema do virial**.

Teorema 3.5.3 (Teorema do virial). *Uma condição necessária para que um sistema seja limitado é que*

$$\langle T \rangle_\tau = -\frac{1}{2} \langle V \rangle_\tau.$$

Demonstração. O operador $\langle \cdot \rangle_\tau$ corresponde à média temporal no intervalo $[0, \tau]$. Pela identidade de Lagrange-Jacobi,

$$\left\langle \frac{dD}{dt} \right\rangle_\tau = 2\langle T \rangle + \langle V \rangle.$$

Se um sistema é limitado então o momento de dilatação D é limitado, e, uma vez que

$$\left\langle \frac{dD}{dt} \right\rangle_\tau = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \frac{dD}{dt} dt = \frac{D(\tau) - D(0)}{\tau},$$

então

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \left| \left\langle \frac{dD}{dt} \right\rangle_\tau \right| \leq \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{D_{\max} - D_{\min}}{\tau} = 0.$$

Assim, vale $\langle T \rangle_\tau = -\frac{1}{2} \langle V \rangle_\tau$. □

É possível estimar uma região do espaço em que vale o equilíbrio (de virial). Considere N partículas dispostas com distância média R_V com massa média $\bar{m} = M/N$, para $M = \sum_{a=1}^N m_a$. Temos que:

$$V = -G \sum_{a < b} \frac{m_a m_b}{r_{ab}} \approx -G \sum_{a < b} \bar{m}^2 \frac{1}{R_V} = -G \frac{M^2}{N^2} \frac{N(N-1)}{2R_V} = -G \frac{M^2}{2R_V} \frac{N-1}{N}.$$

Para N grande, temos que

$$V \approx -\frac{GM^2}{2R_V} \Rightarrow R_V \approx \frac{GM^2}{2|V|}. \quad (3.19)$$

Tal R_V é chamado **raio de virial**. A busca por sistemas estáveis deve começar por sistemas com energia negativa e para os quais valem o teorema do virial, e o raio de virial é útil nesse sentido. Isso é utilizado na geração de valores iniciais na seção 5.2.2, com as condições iniciais propostas por (AARSETH, 2003).

Também pode ser razoável supor que o momento angular total seja não nulo se o propósito for buscar estabilidade com mais facilidade, embora isso não seja condição necessária.

3.6 A Dinâmica de Formas

A Dinâmica de Formas (SD, do inglês *Shape Dynamics*) é uma teoria de gravitação baseada em *relacionalismo*, isto é, os conceitos absolutos de *espaço* e de *tempo* são suprimidos

para basear a física na relação entre os objetos em questão - no caso do PNCG, a relação entre os corpos.

Embora seja um modelo alternativo de gravitação, foi a partir dela que começamos o estudo do PNCG como um todo, através do artigo [BARBOUR, KOSLOWSKI *et al.*, 2014a](#). Por isso, apresentamos nesta seção uma breve introdução à versão quantizada (em massas pontuais) da SD e alguns de seus resultados qualitativos, que na seção [5.5](#) são revisitados e podem ser visualizados através de simulações numéricas.

Nesta seção, algumas demonstrações foram omitidas tendo em vista facilitar a leitura do texto. Estas se encontram no Apêndice [B](#). Além disso, as referências utilizadas encontram-se citadas no texto, mas as principais são o artigo mencionado, [BARBOUR, KOSLOWSKI *et al.*, 2013](#) e [BARBOUR, KOSLOWSKI *et al.*, 2014b](#).

3.6.1 Contextualização e motivação

O objetivo da Dinâmica de Formas é fornecer um modelo de gravitação que comporte a compreensão mecânica do físico e filósofo Ernst Mach (1838-1916), na qual apenas as relações inter-partícula são *reais*. Para o problema de N-corpos em \mathbb{R}^{3N} , tomamos o quociente pelas translações e rotações euclidianas, obtendo o *espaço de configurações relativas* (ECR) machiano, de $3N - 6$ dimensões, o que remove as posições e orientações absolutas. Mais ainda, é preciso quocientar o ECR também em relação a *dilatações*, para remover qualquer influência de escalas. Nisso, obtemos o *espaço de formas* S com $3N - 7$ dimensões.

Observe que ao quocientar \mathbb{R}^{3N} pelas translações, a mecânica vigente ainda é a mecânica newtoniana, uma vez que o potencial newtoniano é invariante sob translações. Já para rotações, a situação não é a mesma, sendo o momento angular um elemento crucial de subsistemas fechados do universo (como o Sistema Solar). O modelo, então, se baseia no pressuposto de que não há rotação global no universo, mas somente rotações locais de subsistemas ([BARBOUR, 2012](#), pg. 264).

Nessa situação, se torna aplicável um princípio que, embora não tenha sido enunciado diretamente por Mach, decorre de sua filosofia ([ASSIS, 1998](#), pg. 139), que é chamado de *princípio de Mach* ou *de Mach-Poincaré*:

Definição 3.6.1 (Princípio de Mach-Poincaré). *A especificação de um ponto e uma direção (forma forte) ou de um ponto e um vetor tangente (forma fraca) no espaço de formas S determinam a evolução em S de forma única.* ([BARBOUR, 2014](#), pg. 31)

É fato importante que como um modelo de gravidade aplicável, existe uma interseção entre a Dinâmica de Formas e a Relatividade Geral, ocorrendo quando a Relatividade Geral comporta o Princípio de Mach-Poincaré: universos espacialmente fechados ([EINSTEIN, 1981](#), pg. 157; [BARBOUR, 2012](#), pg. 258).

De toda forma, há diversas consequências da SD que são interessantes para a física, desde o próprio modelo de gravitação até implicações para uma gravidade quântica ([BARBOUR, 2012](#)). Para este trabalho, o que interessa é a formulação de setas do tempo relacionais, uma forma de observar a evolução de sistemas de N-corpos baseada somente no próprio sistema.

Uma seta do tempo é um observável que não apenas caracteriza a evolução de um sistema dinâmico, mas também fornece uma orientação, no sentido de determinar o que é *passado* e o que é *futuro*. Na física, a maioria das discussões de setas do tempo se baseia no crescimento da entropia, uma medida de “dispersibilidade” de um sistema. Porém, no caso de sistemas puramente gravitacionais e fechados, a entropia como seta do tempo é uma escolha bastante questionável por algumas razões. Por exemplo, a conceitualização original de entropia se baseia em partículas fechadas em um espaço confinado e em um volume total do espaço de fases; ambas as bases não se encaixam ao Universo enquanto um sistema máximo no qual a gravidade é a força dominante.

Voltando ao enunciado sobre o princípio de Mach, o que realmente caracteriza a dinâmica do PNCG está no espaço S . Porém, as equações de movimento de Newton são simétricas no tempo, e portanto incapazes de fornecer uma orientação para a evolução de uma órbita em S . Assim, uma seta do tempo para o PNCG precisa ser caracterizada por alguma assimetria dentro do próprio espaço de formas.

3.6.2 Eliminação da escala

Uma questão sobre o PNCG é que o sistema comporta escalas. No entanto, já foi apresentado que através do Teorema 3.3.1 é possível ignorar a escala, uma vez que aplicar um redimensionamento anisotrópico sobre uma trajetória fornece um conjunto de trajetórias com dinâmicas iguais a menos da escala. Uma representação objetiva do problema precisa ser capaz de condensar esse conjunto infinito de trajetórias dinamicamente equivalentes em uma única órbita em S .

Para isso, podemos utilizar a raiz quadrada do momento de inércia R , pois este representa um tipo de *desvio padrão* do sistema. Nesse caso, é preciso balancear cada posição com relação a sua massa, aplicando a transformação:

$$\boldsymbol{\sigma}_a = \frac{\sqrt{m_a}}{R} \mathbf{q}_a, \quad a = 1, 2, \dots, N. \quad (3.20)$$

Observe que $\boldsymbol{\sigma}_a$ é adimensional. Além disso, trata-se uma coordenada dentro de uma bola unitária espacial na origem de S , uma vez que, por exemplo, para $N = 1$ tem-se:

$$\boldsymbol{\sigma}_a = \frac{\sqrt{m_a} \mathbf{q}_a}{\sqrt{m_a} \|\mathbf{q}_a\|} = \frac{\mathbf{q}_a}{\|\mathbf{q}_a\|},$$

e valores maiores de N oferecem um denominador maior que o numerador.

Podemos obter momentos conjugados para as coordenadas $\boldsymbol{\sigma}_a$ e que atendem à expectativa relacional, de que só é possível estar em movimento se for em relação a outra partícula:

$$\boldsymbol{\pi}_a = \frac{R}{\sqrt{m_a} D_0} \mathbf{p}_a - \frac{D}{D_0} \boldsymbol{\sigma}_a, \quad \forall a = 1, \dots, N,$$

onde D é o momento de dilatação ($D = R\dot{R}$). De fato, um sistema de uma só partícula não

tem movimento:

$$\boldsymbol{\pi}_a = \frac{\sqrt{m_a} \|\mathbf{q}_a\|}{\sqrt{m_a} D_0} \mathbf{p}_a - \mathbf{q}_a \cdot \mathbf{p}_a \frac{\mathbf{q}_a}{D_0 \|\mathbf{q}_a\|} = \frac{1}{D_0} (\|\mathbf{q}_a\| \mathbf{p}_a - \mathbf{p}_a \|\mathbf{q}_a\|) = 0, \quad \text{se } N = 1.$$

Vale ressaltar que o par de coordenadas projetadas $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\pi})$ (chamadas a partir daqui de *objetivas*) ainda não é invariante por rotações. No entanto, obter uma forma explícita e rotacionalmente invariante é difícil, além de pouco produtivo, uma vez que o momento angular comuta em Poisson com a função hamiltoniana. (BARBOUR, KOSLOWSKI *et al.*, 2013, pg. 21; BARBOUR, KOSLOWSKI *et al.*, 2014a). Além disso, como esperado, as coordenadas objetivas possuem propriedades que correspondem às invariâncias exigidas por uma dinâmica adimensional:

$$\begin{aligned} R_\sigma &= \sum_{a=1}^N \boldsymbol{\sigma}_a \cdot \boldsymbol{\sigma}_a = 1, & D_{\sigma, \pi} &= \sum_{a=1}^N \boldsymbol{\pi}^a \cdot \boldsymbol{\sigma}_a = 0, \\ \boldsymbol{\sigma}_{cm} &= \sum_{a=1}^N \sqrt{m_a} \boldsymbol{\sigma}_a = 0, & \boldsymbol{\pi}_\Sigma &= \sum_{a=1}^N \sqrt{m_a} \boldsymbol{\pi}^a = 0. \end{aligned} \quad (3.21)$$

A restrição R_σ força que o sistema seja unitário, pois o que está se fazendo na prática é normalizar R . A restrição $D_{\sigma, \pi}$ corresponde ao processo para D , representando a invariância da escala global. Já $\boldsymbol{\sigma}_{cm}$ corresponde à ausência de movimento do sistema como um todo, análogo à conservação do centro de massas. Por fim, $\boldsymbol{\pi}_\Sigma$ corresponde à invariância do momento total. A demonstração destas propriedades consta no Apêndice B (Proposição B.0.1).

Também é possível verificar que $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\pi})$ são invariantes por escala, uma vez que comutam com D e com R no sistema de coordenadas original

$$\{f(D, R), \boldsymbol{\pi}_a\} = \{f(D, R), \boldsymbol{\sigma}_a\} = 0, \quad (3.22)$$

onde f é um observável para D e R (Proposição B.0.2)

3.6.3 Evolução de um sistema adimensional e complexidade

Uma vez que o sistema deixa de ter escala, sua evolução depende de um correspondente à evolução da escala no problema original. Nesse caso, o momento de dilatação D pode ser interpretado como variável de evolução para $E \geq 0$, uma vez que D é monótono (Teorema 3.3.2). Para descrever o sistema nessa situação, é necessário um hamiltoniano baseado em R e com variável baseada em D que gere translações. Para isso, embora R não seja canonicamente conjugado a D , $\log R$ é (veja equação 2.12), pois

$$\{\log R, D\} = \sum_{a=1}^N \frac{\partial \log R}{\partial \mathbf{q}_a} \frac{\partial D}{\partial \mathbf{p}_a} - \frac{\partial \log R}{\partial \mathbf{p}_a} \frac{\partial D}{\partial \mathbf{q}_a} = \sum_{a=1}^N \frac{1}{R^2} m_a \|\mathbf{q}_a\|^2 = 1.$$

Dessa forma, tomando uma variável de tempo adimensional $\tau = D/D_0$ (considerando $D_0 \neq 0$), temos um hamiltoniano $\mathcal{H} = -\log(R/R_0) + const.$

Descrever a energia cinética desse novo sistema não é difícil. Podemos decompor a

energia cinética original em duas partes, uma correspondente à *dilatação* $T_d = \frac{1}{2}D^2/R^2$ e outra correspondente à *forma* $T_S = \frac{1}{2}D_0^2 K_S/R^2$, onde

$$K_S = \sum_{a=1}^N \boldsymbol{\pi}_a \cdot \boldsymbol{\pi}_a = \frac{2R^2 T - D^2}{D_0^2},$$

pois

$$T_d + T_S = \frac{1}{2} \frac{D^2}{R^2} + \frac{D_0^2}{2R^2} K_S = \frac{1}{2} \left(\frac{D^2}{R^2} + 2T - \frac{D^2}{R^2} \right) = T.$$

A energia potencial, por outro lado, exige mais atenção. Como queremos um sistema invariante por escala, precisamos que o potencial seja homogêneo de grau -2 (BARBOUR, LOSTAGLIO *et al.*, 2013, pg. 5). Por outro lado, observando o sistema original, há duas medidas que caracterizam a dinâmica entre os corpos: a *raiz da média quadrática* ℓ_{rms} :

$$\ell_{rms} := \frac{1}{M^{1/2}} R,$$

e o *comprimento harmônico médio* ℓ_{mhl} :

$$\ell_{mhl} = \frac{M^2}{|V|}. \quad (3.23)$$

O comprimento ℓ_{rms} é uma medida interessante para o sistema como um todo, uma vez que dominam as maiores distâncias entre os corpos. Por outro lado, ℓ_{mhl} é uma medida bastante caracterizada pelas menores distâncias entre os corpos, uma vez que é inversamente proporcional às distâncias.

Unindo a necessidade de um potencial com grau -2 com o que se sabe sobre as escalas, podemos definir a complexidade

$$C_S := \frac{\ell_{rms}}{\ell_{mhl}} = \frac{1}{M^{3/2}} R |V|. \quad (3.24)$$

Observe que, além de atender o desejado, também trata-se de uma medida adimensional, sendo portanto *intrínseca* do espaço S .

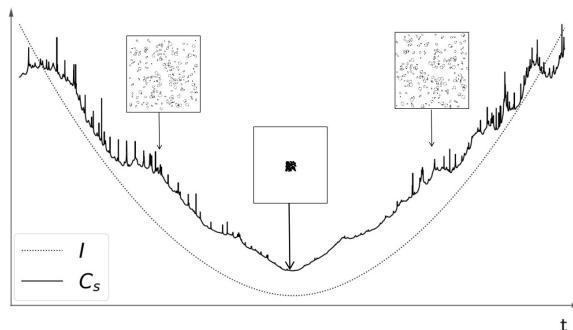


Figura 3.3: Visualização do espalhamento. O gráfico da complexidade corresponde a uma simulação de 100 corpos para $E = 0$.

No caso em que $E = 0$ e $\mathbf{J} = 0$, [MARCHANT e SAARI, 1976](#) mostra que o sistema se divide em subsistemas (indexados por \mathcal{J}), e que cada subsistema, na medida em que se isola cada vez mais, desenvolve quantidade assintoticamente conservadas:

$$\begin{aligned} E_{\mathcal{J}}(t) &= E_{\mathcal{J}}(\infty) + O(t^{-5/3}), \\ \mathbf{J}_{\mathcal{J}}(t) &= \mathbf{J}_{\mathcal{J}}(\infty) + O(t^{-2/3}), \\ \mathbf{X}_{\mathcal{J}}(t)/t &= \mathbf{V}_{\mathcal{J}}(\infty) + O(t^{-1/3}), \end{aligned}$$

onde $\mathbf{X}_{\mathcal{J}}$ é a distância do subsistema \mathcal{J} ao centro de massas total do sistema e $\mathbf{V}_{\mathcal{J}}(\infty)$ é uma constante para a qual $\mathbf{X}_{\mathcal{J}}/t$ tende assintoticamente. Nessa situação, a complexidade caracteriza não apenas o distanciamento total entre os corpos, mas também as variações dentro dos subsistemas, como pode ser observado na figura 3.3, na qual C_S cresce (indicando expansão do sistema) mas também varia (indicando as oscilações nos subsistemas).

3.6.4 Equações de movimento no espaço de formas S

Outro ponto para a complexidade como energia potencial do sistema é o fato de que R remove a dependência da escala de V , então as forças derivadas de C_S são capazes apenas de mudar a forma do sistema, e não o seu tamanho. A função $-\log C_S$ toma o papel de um potencial que leva o sistema para formas mais não-homogêneas.

Com a decomposição da energia cinética e a nova energia potencial, agora é possível obter uma expressão para \mathcal{H} em função de σ e π . Isso é feito tomando em conta que

$$R^2 E - M^3 R C_S - \frac{1}{2} D^2 - \frac{1}{2} D_0^2 K_S = 0,$$

e então se $E = 0$ é possível obter uma expressão para R , e consequentemente para \mathcal{H} :

$$\mathcal{H}(\tau) = \log(K_S + \tau^2) - \log C_S. \quad (3.25)$$

Para esse hamiltoniano τ -dependente, obtemos um conjunto de equações de Hamilton também τ -dependentes:

$$\frac{d\sigma_a}{d\tau} = \frac{2\pi_a}{K_S + \tau^2}, \quad \frac{d\pi_a}{d\tau} = \frac{\partial \log C_S}{\partial \sigma_a} - \frac{K_S}{K_S + \tau^2} \sigma. \quad (3.26)$$

3.6.5 A escala como fricção em S

A dependência temporal de \mathcal{H} pode ser eliminada através de uma mudança de coordenadas. Tomando $\lambda = \log \tau$ e definindo $\omega_a = \pi^a / \tau$ como um novo momento conjugado adimensional, obtemos um novo hamiltoniano H_0 dado por

$$H_0 = \log \left(\sum_{a=1}^N \omega^a \cdot \omega^a + 1 \right) - \log C_s, \quad (3.27)$$

O custo dessa transformação é obter um conjunto não canônico de equações de movimento:

$$\frac{d\sigma_a}{d\lambda} = \frac{\partial H_0}{\partial \omega_a}, \quad \frac{d\omega_a}{d\lambda} = -\frac{\partial H_0}{\partial \sigma_a} - \omega_a. \quad (3.28)$$

O termo ω_a na equação do momento é um tipo de *fricção sobre as equações*, indicando que existe dissipação. Dinamicamente, isso indica que o distanciamento dos subsistemas, refletido no problema original no aumento da escala, é refletido em S por uma desaceleração na medida em que se aproxima do bordo da esfera unitária, ao ponto de, no limite, ter velocidade nula. Isso caracteriza uma assimetria sobre as trajetórias em S .

Por outro lado, o sistema com H_0 indica mais nitidamente o comportamento do sistema. Uma vez que o movimento é regido por um potencial $-\log C_S$ sujeito a fricção linear, C_S deve crescer indefinidamente no problema com integrais primeiras nulas. Além disso, a dinâmica para H_0 tem um início delimitado, com um passado distante sendo o ponto-limite em que $D = 0$. Isso reforça que C_S possui um mínimo global, denominado *Ponto de Janus*, a partir do qual o sistema pode evoluir em duas direções ($D > 0$ e $D < 0$), sendo cada direção orientada pelo crescimento de C_S . Dessa forma, C_S caracteriza uma seta do tempo para o PNCG.

3.6.6 Observações

O caso em que $\mathbf{J} = 0$ mas $E > 0$, porém, é particularmente interessante, pois grande parte da teoria apresentada permanece válida. No lugar do \mathcal{H} de 3.25, obtemos um hamiltoniano diferente:

$$\mathcal{H} = \log \left[C_S + \sqrt{C_S^2 + \frac{1}{2}\epsilon(K_S + \tau^2)} \right], \quad \epsilon = ED_0^2.$$

Nesse caso, o princípio de Mach-Poincaré falha, uma vez que é necessário especificar $\epsilon \tau^2$, mas a dinâmica continua invariante por escala e totalmente adimensional com uma variável monótona independente. No entanto, a evolução final fica mais firmemente estabelecida: o potencial é dependente do tempo e é idêntico a C_S somente no instante inicial, apresentando um comportamento dissipativo com o tempo. Assintoticamente, o sistema congela.

Outros valores para as integrais primeiras podem ser considerados. No entanto, se E e \mathbf{J} não são nulos as trajetórias não se resumem a S , mas dependem de outras estruturas externas. Uma vez que, como mencionado, o caso com integrais primeiras nulas quando estendido para a versão relativística da Dinâmica de Formas coincide com a Relatividade Geral, são valores razoáveis para se assumir como hipótese.

Outro ponto é sobre o processo de obtenção de C_S . Embora soe artificial a definição da complexidade como feita, C_S é adimensional e caracteriza intrinsecamente a dinâmica do PNCG, sendo portanto um valor que de fato *existe* para o problema. Por outro lado, separar a evolução do sistema entre R e V , entre os corpos distantes e os corpos próximos, é o que se poderia chamar de artificial.

Assim, para além de um modelo interessante, a Dinâmica de Formas foi introduzida neste trabalho primeiro como motivação, e segundo como uma fonte de propriedades

qualitativas do PNCG que podem ser visualizadas através de simulações numéricas. Na seção 5.5 nós retomamos e aplicamos numericamente um pouco do que foi apresentado nesta seção.

Capítulo 4

Métodos numéricos

A integração numérica é o processo de aproximar o valor de uma integral numericamente com alguma margem de erro. Existe uma infinidade de formas de calcular essa aproximação, desde métodos baseados puramente em ferramentas básicas de cálculo até métodos baseados em teoria de variedades diferenciáveis e grupos de Lie.

Neste capítulo apresentamos uma pequena parte destes métodos, aplicando-os especificamente para a integração temporal, e contemplando principalmente o que foi utilizado nas simulações do PNCG. O capítulo começa com métodos tradicionais, baseados em cálculo de derivadas e geometria, principalmente para facilitar a habituação com os conceitos de integração numérica. Recomendamos [ROMA et al., s.d.](#) e [BUTCHER, 2016](#) para um estudo mais aprofundado.

Em seguida, entramos no ramo dos integradores simpléticos, aplicando numericamente os conceitos apresentados no capítulo 2 a respeito da Mecânica Hamiltoniana. Em resumo, os integradores simpléticos são elaborados levando-se em conta não somente aspectos geométricos da função que está sendo integrada, mas também de todo o espaço que a contém. No caso, integramos sistemas hamiltonianos e portanto as propriedades do espaço de fases, como as integrais primeiras, são levadas em conta nos métodos através do conceito de *simplectomorfismo*. A bibliografia principal utilizada e altamente recomendada é [HAIRER et al., 2006](#) e [LEIMKUHLER e REICH, 2005](#).

Ao final, apresentamos um corretor numérico utilizado posteriormente à integração. O corretor se baseia nas integrais primeiras e aplica uma projeção via método de quadrados mínimos entre as hipersuperfícies no espaço de fases, fornecendo uma aproximação verossímil ao problema no sentido de que a estrutura simplética passa a ser conservada nas trajetórias ainda que não seja utilizado um integrador simplético.

Existem muitos outras formas de fazer a integração numérica. Em muitos contextos são utilizados métodos implícitos (explicados mais adiante), métodos com tamanho de passo variável, e até métodos voltados especificamente para o PNCG que preservam a energia e o momento angular com precisão de máquina, como [KOTOVYCH e BOWMAN, 2002](#) propõem. Neste trabalho nos limitamos aos métodos explícitos tradicionais e aos simpléticos.

Por fim, os métodos foram testados com problemas-modelo escolhidos. Estes constam

no Anexo A.

4.1 Conceitos básicos de integração numérica

A ideia dos integradores numéricos é aproximar a solução exata de um problema de Cauchy em um intervalo $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$, discretizando-o em um conjunto finito de $m + 1$ pontos na forma

$$t_0 = a, \quad t_1 = t_0 + h_1 \quad \dots \quad t_m = t_{m-1} + h_m = b,$$

onde cada $h_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$, é um *passo de integração do instante i* . Neste trabalho, exceto quando explicitado o contrário, $h_i = h = (b - a)/m$, para todo i , então a discretização assume a forma

$$t_k = a + hk, \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

Com o intervalo discretizado, é possível obter uma diversidade de discretizações do problema em si. Assim, um problema do tipo

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}y(t) = f(t, y(t)), & t \in [a, b], \\ y(t_0) = y(a) = y_0, \end{cases} \quad (4.1)$$

com $f : [a, b] \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ e y com condições suficientes para garantir existência e unicidade em $[a, b]$, pode ser discretizado na forma:

$$y(t_{k+1}) \approx y_{k+1} = \Phi_h(t_k, y_k), \quad k = 0, 1, \dots, m - 1,$$

onde Φ_h é chamado *fluxo numérico* ou *discreto*. Quando depender somente de h , t_k e y_k , diremos que Φ_h é um *método de passo único*; no caso contrário, será um *método de passo múltiplo*.

Para cada instante da aproximação, podemos definir um *erro local de discretização*.

Definição 4.1.1. *O erro local de discretização* α_k do método numérico Φ_h em um instante discretizado $t_k \in [a, b]$ é dado por:

$$\alpha_k := \frac{y(t_{k+1}) - \Phi_h(t_k, y(t_k))}{h}.$$

Nesse sentido, suponha que Φ_h é um método de passo único, ou seja, $\Phi_h(t_k, y_k) = y_k + h\tilde{\Phi}_h(t_k, y_k)$. Pensando na integração de Riemann, é intuitivo que quanto menor o tamanho de h , menor também será o erro. Porém, se $h \rightarrow 0$, uma vez que $t_k = hk + t_0$, teria-se que $t_k = t_0$ sempre. A saída para isso é fixar $t \in [a, b]$ e manter $hk = t - t_0$ fixo

com $h \rightarrow 0$, o que significa que $k \rightarrow \infty$. Temos então para o erro local:

$$\begin{aligned}\lim_{h \rightarrow 0} \alpha_k &= \lim_{h \rightarrow 0} \left[\frac{y(t_{k+1}) - \Phi_h(t_k, y(t_k))}{h} \right] \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \left[\frac{y(t_k + h) - y(t_k)}{h} - \tilde{\Phi}_h(t_k, y_k) \right] \\ &= f(t, y(t)) - \tilde{\Phi}_0(t, y(t)).\end{aligned}$$

Para um problema bem posto, espera-se de um método numérico então que o erro local deva ser cada vez menor, e que no limite seja zero. Nesse caso, dizemos que o método é *consistente*.

Definição 4.1.2. *Dizemos que um integrador de passo único $\Phi_h(t_k, y_k) = y_k + h\tilde{\Phi}_h(t_k, y_k)$ é consistente se $\tilde{\Phi}_0(t, y) = f(t, y)$ ou, equivalentemente, $\lim_{h \rightarrow 0} \alpha_k = 0$, para $t \in [a, b]$ com $hk = t - t_0$ fixado.*

A consistência garante que, em alguma medida, a aproximação fornecida pelo método numérico (a partir de um valor exato e conhecido da trajetória) é próxima da solução exata do problema. Assim, também é possível atribuir à consistência uma *ordem* da maneira que segue.

Definição 4.1.3. *Se existirem $C, h_0, q > 0$ para quaisquer h e k , tais que o erro local satisfaça:*

$$\max_k \|\alpha_k\| \leq Ch^q, \quad 0 < h \leq h_0,$$

então o método tem ordem de consistência q atrelada a norma $\|\cdot\|$, que, a menos da explicitação do contrário, será a norma euclidiana usual. Nesse caso, um método consistente com ordem de consistência q pode ser escrito da seguinte maneira:

$$y(t_{k+1}) = \Phi_h(t_k, y_k) + O(h^q).$$

O que ocorre, porém, é que no geral se conhece somente o valor inicial do problema, e então define-se outra medida de erro, chamada *erro global*.

Definição 4.1.4. *O erro global $e_h(t_k)$ é o erro acumulado pelo método numérico até o instante discreto t_k :*

$$e_h(t_k) := e_k := y(t_k) - y_k.$$

O que se espera de um método minimamente utilizável é que seu erro global esteja ligado somente com o tamanho do passo h , de modo que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{e_k}{h} = 0, \quad k = 0, 1, \dots, m-1. \quad (4.2)$$

para qualquer problema de Cauchy bem posto.

Definição 4.1.5. *Um integrador Φ_h para o qual vale 4.2 para qualquer problema de Cauchy bem posto é dito **convergente**, e dizemos que o integrador de passo único e explícito tem*

ordem de convergência p se, e só se,

$$e_h(t) = O(h^{p+1}).$$

A partir do erro global, é possível determinar condições suficientes para que um método de passo único explícito seja convergente. Supondo que $\tilde{\Phi}_h(t_k, \mathbf{y}_k) = \frac{1}{h}(\Phi_h(t_k, \mathbf{y}_k) - \mathbf{y}_k)$ satisfaça a condição de Lipschitz para \mathbf{y} , ou seja,

$$\left\| \tilde{\Phi}_h(t, \mathbf{y}_1) - \tilde{\Phi}_h(t, \mathbf{y}_2) \right\| \leq L \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|$$

e que o erro de discretização local α_k seja limitado por α , então (ROMA *et al.*, s.d., pg. 29)

$$\|e_k\| \leq e^{khL} \|e_0\| + \frac{e^{khL} - 1}{L} \alpha. \quad (4.3)$$

Para o que interessa neste trabalho, $\|e_0\| = 0$, então se um método explícito e de passo único é consistente com ordem q , ou seja, existe C constante tal que $\alpha = Ch^q$, então

$$\|e_k\| \leq \frac{e^{khL} - 1}{L} Ch^q.$$

Dessa forma, o método também é convergente de ordem q .

Através do erro global, também é possível obter uma expansão em série de potências para uma aproximação numérica. Trataremos a questão para problemas de Cauchy em \mathbb{R} por maior facilidade de exposição, mas todo o processo pode ser estendido para mais dimensões aplicando normas sobre os vetores.

Teorema 4.1.1. (ROMA *et al.*, s.d., pg. 30) *Considere um problema de Cauchy com solução suficientemente diferenciável em um intervalo $[a, b]$ e uma aproximação $\eta(t, h)$ obtida através de um método de passo único*

$$\eta_{k+1} = \eta_k + h\tilde{\Phi}(t_k, \eta_k, h)$$

de ordem p com tamanho de passo fixo $h = (t - t_0)/n$ para cada $t_0, t \in [a, b]$ e n inteiro positivo. Nessas condições, $\eta(t, h)$ admite expansão em potências de h da forma

$$\eta(t, h) = y(t) + h^p e_p(t) + h^{p+1} e_{p+1}(t) + \dots + h^N e_N(t) + h^{N+1} E_{N+1}(t, h).$$

Do teorema 4.1.1 decorre que o erro de discretização global no instante t pode ser escrito como

$$-e_h(t) = \eta(t, h) - y(t) = \sum_{j=p}^N h^j e_j(t) + h^{N+1} E_{N+1}(t, h).$$

Nesse sentido, para um h suficientemente pequeno, temos uma aproximação razoável para o erro:

$$-e_h(t) = \eta(t, h) - y(t) \approx e_p(t)h^p.$$

Observe que a diferença entre aproximações com tamanho de passo h e $h/2$ pode ser aproximado por

$$\eta(t, h) - \eta(t, h/2) \approx e_p(t) \left(\frac{h}{2}\right)^p (2^p - 1)$$

e logo

$$e_p(t) \left(\frac{h}{2}\right)^p \approx \frac{\eta(t, h) - \eta(t, h/2)}{2^p - 1}.$$

Isso fornece um valor aproximado para $e_{h/2}(t)$ se considerando um $h > 0$ suficientemente pequeno:

$$e_{h/2}(t) \approx -\frac{\eta(t, h) - \eta(t, h/2)}{2^p - 1}.$$

Todo esse processo supõe que o valor de p é conhecido. No entanto, para fins práticos, é possível estimar p realizando simulações com diferentes tamanhos de passo. Para um tamanho de passo h de referência, considere $\eta(t, 2h)$, $\eta(t, h)$ e $\eta(t, h/2)$. Temos:

$$\left| \frac{\eta(t, 2h) - \eta(t, h)}{\eta(t, h) - \eta(t, h/2)} \right| \approx \left| \frac{e_{\tilde{p}}(t)(2^{\tilde{p}} - 1)h^{\tilde{p}}}{e_{\tilde{p}}(t)(1 - 2^{-\tilde{p}})h^{\tilde{p}}} \right| = 2^{\tilde{p}},$$

então

$$\tilde{p} \approx \log_2 \left| \frac{\eta(t, 2h) - \eta(t, h)}{\eta(t, h) - \eta(t, h/2)} \right|. \quad (4.4)$$

Para triplas de passos $(2h, h, h/2)$, $(h, h/2, h/4)$, ..., cada vez menores, a sequência $\tilde{p}_1, \tilde{p}_2, \dots$ converge para p .

Para mais detalhes de integradores de passo único, o material de [ROMA et al., s.d.](#), o qual foi consultado para esta seção, é bastante agregador. Para agora, com esses conceitos em mãos, já é possível começar a busca por integradores numéricos tradicionais, baseados somente em conceitos de cálculo e geometria analítica.

4.2 Métodos tradicionais de integração numérica

4.2.1 Integradores básicos de primeira ordem

Considere o problema 4.1. Uma primeira ideia para produzir métodos numéricos é utilizar da linearização fornecida pela primeira derivada temporal para, a partir de um instante t_k , aproximar a trajetória no instante t_{k+1} , o que naturalmente é possível para qualquer problema de Cauchy bem posto. Essa aproximação é chamada de *método de Euler explícito*.

Método 4.2.1 (Euler explícito). *Para $h = (b - a)/m$ e $k = 0, 1, \dots, m-1$, temos a aproximação:*

$$t_{k+1} = t_k + h, \quad y_{k+1} = y_k + hf(t_k, y_k) = \Phi_h(t_k, y_k).$$

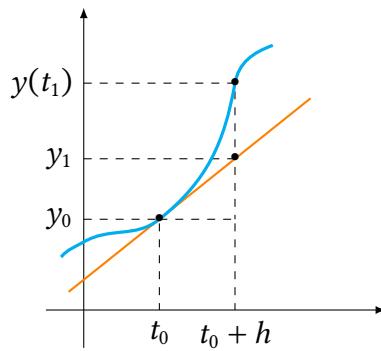


Figura 4.1: Visualização geométrica do método de Euler explícito, onde a curva é a solução exata e a reta é a solução aproximada.

O método de Euler explícito é assim chamado pois fornece explicitamente a sua aproximação em função do instante e do passo anterior, como pode ser visualizado na figura 4.1. Uma outra forma de utilizar a primeira derivada é de maneira implícita, no que é chamado *método de Euler implícito*.

Método 4.2.2 (Euler implícito). *Para $h = (b - a)/m$ e $k = 0, 1, \dots, m-1$, temos a aproximação:*

$$t_{k+1} = t_k + h, \quad y_{k+1} = y_k + hf(t_{k+1}, y_{k+1}) = \Phi_h(t_{k+1}, y_{k+1}).$$

Nesse caso, para avançar a solução no tempo é necessário não apenas aplicar uma fórmula, mas resolver um sistema algébrico de equações geralmente não-lineares no qual y_{k+1} é a incógnita, o que não só exige mais processamento quando utilizado na prática como também pode acumular erros que estão além do método utilizado. Por exemplo, nesses casos é comum utilizar algum método de ponto fixo ou mesmo métodos de Newton ou Quasi-Newton, sendo que nos últimos casos é necessária a estimativa numérica de uma matriz jacobiana $n \times n$ e um certo número de iterações para garantir convergência, o que é custoso e, como todo método numérico, agrega com mais um erro acumulado. Por conta de tudo isso, os métodos numéricos implícitos não foram utilizados nas maiores simulações e não serão tratados neste trabalho. Ainda assim, tais métodos contam com certas vantagens que serão comentadas no decorrer do texto. Mais detalhes dos métodos implícitos e seu uso podem ser encontrados em HAIRER *et al.*, 2006.

Quanto à consistência e à convergência, os métodos propostos são consistentes com 1^a ordem de convergência, pois

$$\begin{aligned} e_h(t_{k+1}) &= y(t_{k+1}) - \Phi_h(t_k, y(t_k)) \\ &= \left(y(t_k) + h\dot{y}(t_k) + \frac{h^2}{2!}\ddot{y}(\xi) \right) - (y(t_k) + hf(t_k, y_k)) \\ &= \frac{h^2}{2}\ddot{y}(\xi), \quad \xi \in (t_k, t_{k+1}), \end{aligned}$$

o que pela definição 4.1.5 implica a ordem 1.

Para exemplificar, considere o problema-modelo A.1 aplicado nos métodos descritos

com tamanhos de passo $1/20, 1/40, \dots, 1/1280$. O resultado pode ser visualizado na tabela 4.1.

h	Explícito	Implícito
$1/40$	0.712071	1.859924
$1/80$	0.827102	1.283719
$1/160$	0.904085	1.122329
$1/320$	0.949289	1.057240
$1/640$	0.973898	1.027730

Tabela 4.1: Convergência dos métodos de Euler explícito e implícito no problema-modelo A.1.

Para a aplicação do método de Euler implícito foi utilizado o método de ponto fixo

$$\mathbf{y}_{k+1}^{[0]} = \mathbf{y}_k, \quad \mathbf{y}_{k+1}^{[i+1]} = \mathbf{y}_k + h f(t_{k+1}, \mathbf{y}_{k+1}^{[i]}),$$

para $i = 1, \dots, Q$. Existem diversos critérios para a aplicação deste método (HAIRER *et al.*, 2006, pgs. 325–335). Porém, como o método não foi de fato utilizado em mais nenhuma outra situação e não foi de nosso interesse neste momento trabalhar com os métodos implícitos no geral, Q foi fixado para $Q = 100$ e isso foi mais que suficiente para convergência.

4.2.2 Métodos de Runge-Kutta

Uma primeira ideia para obter métodos de ordem mais alta pode ser utilizar séries de Taylor, uma vez que o próprio método de Euler explícito pode ser encontrado via Taylor. O método resultante é como segue.

Método 4.2.3 (Série de Taylor). *Suponha que f do problema 4.1 é de ordem no mínimo \mathcal{C}^q , e seja h um tamanho de passo fixo. Então*

$$\Phi_h(t, \mathbf{y}) = \mathbf{y}_k + h f(t, \mathbf{y}) + \frac{h^2}{2!} Df(\mathbf{y}, \mathbf{y}) + \frac{h^3}{3!} D^2 f(t, \mathbf{y}) + \dots + \frac{h^q}{q!} D^{q-1} f(t, \mathbf{y}),$$

onde $D = \frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}$.

É possível verificar que tal método tem ordem q (ROMA *et al.*, s.d., pg. 42). No entanto, tal método traz uma barreira no geral intransponível de maneira analítica para problemas práticos: é preciso encontrar as $q - 1$ derivadas de f .

Os métodos de Runge-Kutta surgem nesse contexto, a partir da generalização do método de Euler para ordens mais altas, permitindo obter um método de passo único explícito, que concorda com o método 4.2.3 para uma dada ordem q e que substitui o cálculo das derivadas de f por médias ponderadas e aplicações de f , ou *estágios*, em pontos estratégicos.

Método 4.2.4 (Runge-Kutta de R -estágios). *Considere o problema 4.1 e tome um tamanho de passo h fixo. Temos*

$$\Phi_h(t_k, \mathbf{y}_k) = \mathbf{y}_k + h \sum_{r=1}^R b_r \boldsymbol{\kappa}_r = \mathbf{y}_k + h \mathbf{b}^T \mathbf{K}, \quad \mathbf{K} = (\boldsymbol{\kappa}_1, \dots, \boldsymbol{\kappa}_R)$$

onde

$$\kappa_r(t, \mathbf{y}) = f \left(t + hc_r, \mathbf{y} + h \sum_{j=1}^R a_{rj} \kappa_j \right), \quad 1 \leq r \leq R.$$

Os parâmetros a_{rj} , b_r e c_r variam para cada método, mas para métodos explícitos sempre satisfazem as relações

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad & \sum_{r=1}^R b_r = 1, \\ \text{(ii)} \quad & c_r = \sum_{j=1}^{r-1} a_{rj}, \quad 2 \leq r \leq R. \end{aligned} \tag{4.5}$$

A condição (i) é suficiente e necessária para consistência, pois $h \rightarrow 0$ leva $\kappa_r(t, \mathbf{y}) \rightarrow f(t, \mathbf{y})$, então

$$\sum_{r=1}^R b_r \kappa_r = f(t, \mathbf{y}) \sum_{r=1}^R b_r = f(t, \mathbf{y}).$$

Já (ii) garante a concordância com o método de Taylor, conforme [ROMA et al., s.d.](#), pg. 45.

Uma notação comum para representar as constantes a_{rj} , b_r e c_r é a Tabela de Butcher, dada pela seguinte forma:

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

Tabela 4.2: Tabela de Butcher.

Observe que o método de Euler explícito (método 4.2.1) é um método de Runge-Kutta de ordem 1 com tabela

$$\begin{array}{c|c} 0 & 1 \\ \hline & 1 \end{array}$$

Tabela 4.3: Tabela de Butcher para os métodos de Euler explícito e implícito, respectivamente.

Uma grande quantidade de métodos de Runge-Kutta é conhecida, com as mais diferentes ordens. Vale ressaltar também que a ordem de um método de Runge-Kutta é sempre menor ou igual ao número de estágios, ou seja, um método explícito de ordem p tem uma quantidade de estágios $s \geq p$. Mais ainda, se $p \geq 5$, então $s > p$. No geral, parece existir uma tendência de que conforme p aumenta, o valor mínimo de s passa a ser $p + k_p$, para k_p uma constante associada a p . Isso, porém, é ainda um problema não resolvido acerca dos métodos de Runge-Kutta ([BUTCHER, 2016](#), pgs. 187–196).

Apresentamos a seguir os métodos de ordem 2, 3 e 4, que são os métodos tradicionais mais frequentemente utilizados ([ROMA et al., s.d.](#), pgs. 46–47).

Método 4.2.5 (Runge-Kutta de Segunda Ordem e Dois Estágios (RK22)). *O método RK22 tem a seguinte Tabela de Butcher:*

0	
1/2	1/2
	0 1

Tabela 4.4: Tabela de Butcher para o método RK22.

Método 4.2.6 (Runge-Kutta de Terceira Ordem e Três Estágios (RK33)). *O método RK33 tem a seguinte Tabela de Butcher:*

0	
1/2	1/2
1	-1 2
	1/6 4/6 1/6

Tabela 4.5: Tabela de Butcher para o método RK33.

Método 4.2.7 (Runge-Kutta de Quarta Ordem e Quatro Estágios (RK44)). *O método RK44 tem a seguinte Tabela de Butcher:*

0	
1/2	1/2
1/2	0 1/2
1	0 0 1
	1/6 1/3 1/3 1/6

Tabela 4.6: Tabela de Butcher para o método RK44.

O mesmo método para depuração da ordem dos métodos (ver (4.4)) pode ser aplicado para os métodos de Runge-Kutta no problema-modelo A.1. O resultado consta na tabela 4.7.

h	RK22	RK33	RK44
1/40	1.989241	2.936490	4.041771
1/80	2.003212	2.965188	4.025951
1/160	2.003873	2.981701	4.014280
1/320	2.002516	2.990612	4.008214
1/640	2.001404	2.995243	3.992159

Tabela 4.7: Convergência dos métodos RK22, RK33 e RK44 no problema-modelo A.1

4.2.3 Estabilidade dos integradores tradicionais

Outra questão importante a se analisar sobre integradores numéricos é como se comportam em intervalos ilimitados, não apenas em intervalos limitados como feito até então. Para isso, é utilizado como problema modelo o problema de valor inicial mais simples possível:

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \mathbf{M}\mathbf{y}(t), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad (4.6)$$

sendo \mathbf{M} uma matriz constante. O método de Euler explícito aplicado com um tamanho de passo h assume a seguinte forma para o instante $t_k = t_0 + kh$:

$$\mathbf{y}_k = (\mathbf{I} + h\mathbf{M})\mathbf{y}_{k-1} \quad \therefore \quad \mathbf{y}_k = (\mathbf{I} + h\mathbf{M})^k \mathbf{y}_0. \quad (4.7)$$

Além disso, da teoria de equações diferenciais, sabemos que a solução exata do problema (4.6) é

$$\mathbf{y}(t_k) = \exp(kh\mathbf{M})\mathbf{y}_0. \quad (4.8)$$

Considere uma mudança de base tal que $\mathbf{y}(t) = \mathbf{A}\mathbf{z}(t)$ e $\mathbf{y}_k = \mathbf{A}\mathbf{z}_k$, sendo \mathbf{A} uma matriz constante e não singular. Temos então o problema nas novas coordenadas:

$$\dot{\mathbf{z}}(t) = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{A}\mathbf{z}(t) = \mathbf{B}\mathbf{z}(t), \quad \mathbf{z}(t_0) = \mathbf{z}_0, \quad (4.9)$$

com solução exata

$$\mathbf{z}(t_k) = \exp(kh\mathbf{B})\mathbf{z}_0 \quad (4.10)$$

e solução aproximada

$$\mathbf{z}_k = (\mathbf{I} + h\mathbf{B})^k \mathbf{z}_0. \quad (4.11)$$

Se a transformação escolhida é tal que \mathbf{B} é a forma canônica de Jordan de \mathbf{M} , então para cada autovalor λ tem-se uma equação diferencial da forma

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \lambda \mathbf{y}(t), \quad (4.12)$$

chamada **problema modelo** se $\operatorname{Re} \lambda < 0$, com solução

$$\mathbf{y}(t_k) = \exp(kh\lambda)\mathbf{y}_0. \quad (4.13)$$

Assim, para o método de Euler explícito ser adequado é necessário que $(1 + h\lambda)^k$ seja uma aproximação aceitável para $\exp(kh\lambda)$, ou que no mínimo $(1 + h\lambda)^k$ tenha comportamento limitado para $k \rightarrow \infty$ quando $\exp(kh\lambda)$ for limitado. Isso ocorre se e somente se $|1 + h\lambda| \leq 1$. Tomando $z = h\lambda$, a região complexa $|1 + z| \leq 1$ é chamada de **região estável** para o método de Euler explícito, conforme figura 4.2.

Definição 4.2.1 (Estabilidade de métodos numéricos). *O problema de valor inicial*

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \lambda \mathbf{y}(t), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad \operatorname{Re} \lambda < 0$$

é chamado de problema modelo. Considere um método de passo único que aplicado ao problema modelo fornece a expressão

$$\mathbf{y}_{k+1} = \phi(\lambda h)\mathbf{y}_k.$$

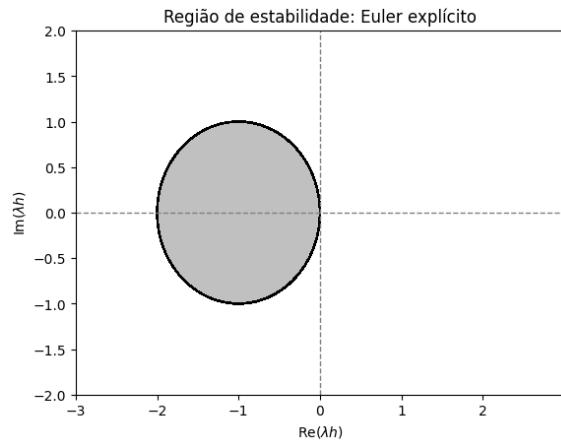


Figura 4.2: Região de estabilidade para o método de Euler explícito.

O conjunto $\Omega = \{\eta \in \mathbb{C} : |\phi(\eta)| < 1\}$ é denominado **região de estabilidade absoluta** para $h > 0$ fixado, $\phi(\lambda h)$ é chamado **fator de amplificação** e o intervalo $I_e = \Omega \cap \mathbb{R}$ é o **intervalo de estabilidade absoluta** do método. Um método **absolutamente estável** é também chamado de **A-estável**.

Observando a região de estabilidade do método de Euler explícito, é fácil concluir que o método não é A-estável, uma vez que $|1 + h\lambda| \leq 1$ somente se $h \leq -\text{Re } \lambda/|\lambda|$. Dizemos então que trata-se de um método **condicionalmente estável**.

Por outro lado, o método de Euler implícito (método 4.2.2) tem uma comportamento diferente. Aplicando o mesmo processo anterior, obtemos a expressão

$$\mathbf{y}_k = (1 - z)^{-1} \mathbf{y}_{k-1}, \quad (4.14)$$

e então sua região estável é $|1 - z| \geq 1$, como na figura 4.3. Nesse caso, $\phi(\lambda h) = (1 - \lambda h)^{-1}$, então para qualquer $h > 0$ temos que $|\phi(\lambda h)| < 1$.

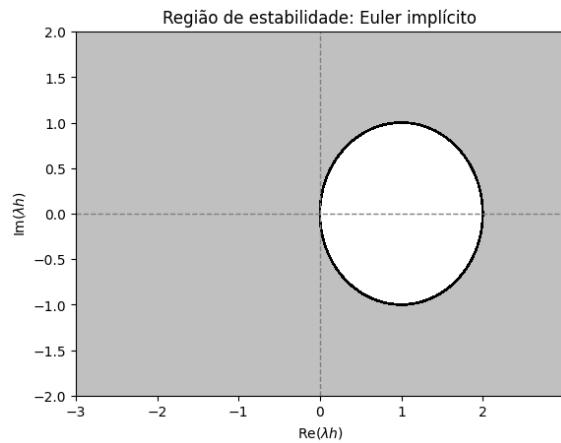


Figura 4.3: Região de estabilidade do método de Euler implícito

É possível generalizar essa ideia para os métodos de Runge-Kutta. Tomando um método de ordem s com tabela

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

temos para o problema modelo:

$$\mathbf{K} = (\mathbf{I} - h\lambda\mathbf{A})^{-1}\lambda\mathbf{1}y_0 = (\mathbf{I} - z\mathbf{A})^{-1}\lambda\mathbf{1}y_0, \quad (4.15)$$

então

$$y_1 = y_0 + h\mathbf{b}^T \mathbf{K} = [1 + z\mathbf{b}^T(\mathbf{I} - z\mathbf{A})^{-1}\mathbf{1}]y_0 = R(z)y_0, \quad (4.16)$$

sendo $R(z)$ o fator de ampliação do método. Para o caso de métodos explícitos, a matriz \mathbf{A} é triangular com diagonal nula, e portanto nilpotente com algum grau k . Através de uma expansão algébrica pode-se concluir que

$$(\mathbf{I} - z\mathbf{A}) = \mathbf{I} + \sum_{j=1}^{k-1} z^j \mathbf{A}^j. \quad (4.17)$$

Substituindo (4.17) em (4.16),

$$\begin{aligned} R(z) &= 1 + z\mathbf{b}^T(\mathbf{I} + \sum_{j=1}^{k-1} z^j \mathbf{A}^j)\mathbf{1} \\ &= 1 + z\mathbf{b}^T \mathbf{I} \mathbf{1} + \mathbf{b}^T \sum_{j=1}^{k-1} z^{j+1} \mathbf{A}^j \mathbf{1}. \end{aligned}$$

A partir de (4.5), temos por (i) que $\mathbf{b}^T \mathbf{I} \mathbf{1} = \sum_{j=1}^s b_j = 1$. Temos então que

$$R(z) = 1 + z + \sum_{j=1}^{k-1} z^{j+1} \mathbf{A}^j \mathbf{1}. \quad (4.18)$$

No caso dos métodos explícitos em que $p = s$, temos os seguintes fatores:

$$R(z) = \begin{cases} 1 + z, & p = 1, \\ 1 + z + \frac{1}{2}z^2, & p = 2, \\ 1 + z + \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{6}z^3, & p = 3, \\ 1 + z + \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{6}z^3 + \frac{1}{24}z^4, & p = 4. \end{cases} \quad (4.19)$$

A região de estabilidade absoluta desses métodos pode ser vista na figura 4.4, sendo o interior de cada curva fechada.

Uma vez que as regiões de estabilidade são fechadas pois o fator é polinomial, os métodos de Runge-Kutta explícitos não são A-estáveis. Porém, da mesma forma que no caso dos métodos de Euler explícito e implícito, é possível obter A-estabilidade utilizando métodos implícitos.

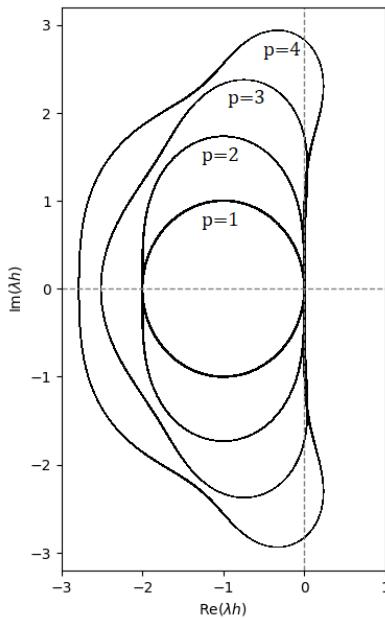


Figura 4.4: Região de estabilidade dos métodos de Runge-Kutta de ordens e estágios $p = 1, 2, 3$ e 4 .

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

Tabela 4.8: Método de Runge-Kutta implícito de quarta ordem e dois estágios. (BUTCHER, 2016, pg. 99)

Por exemplo, considere o método de quarta ordem da tabela 4.8. Seu fator de ampliação é

$$R(z) = \frac{1 + \frac{z}{2} + \frac{z^2}{12}}{1 - \frac{z}{2} + \frac{z^2}{12}}.$$

Observe que $|R(z)| \leq 1$ somente se $\operatorname{Re} z \leq 0$, e uma vez que $z = \lambda h$ com $\operatorname{Re} \lambda < 0$, qualquer valor de h garante estabilidade para o método, sendo então A-estável.

Apesar da maior facilidade para obter métodos implícitos de altas ordens e estáveis, a necessidade de utilizar métodos iterativos para resolver o sistema de equações pode não compensar computacionalmente tais ganhos qualitativos. Ainda assim, os métodos de Runge-Kutta implícitos são utilizados em diversas aplicações, inclusive porque todas as versões simpléticas dos métodos RK são necessariamente implícitas (veja o Teorema 4.3.2).

De toda forma, a A-estabilidade, por definição, se aplica para problemas lineares, o que não é o caso da grande maioria de aplicações práticas dos integradores numéricos. No entanto, muitos sistemas podem ser aproximados localmente por sua linearização, sendo então possível aplicar os resultados de estabilidade para obter tamanhos de passo adequados.

No problema de N-corpos, utilizar o método de Euler implícito não apresentou nenhuma

vantage. No entanto, ainda é possível observar algumas anomalias esperadas para cada método simulando, por exemplo, o problema-modelo A.1. Na figura 4.5 é possível observar a diferença na divergência entre os dois métodos quando comparados a um método simplético de alta ordem. Enquanto o método de Euler explícito apresenta um afastamento de órbita mais prolongado, o método de Euler implícito apresenta afastamentos mais breves.

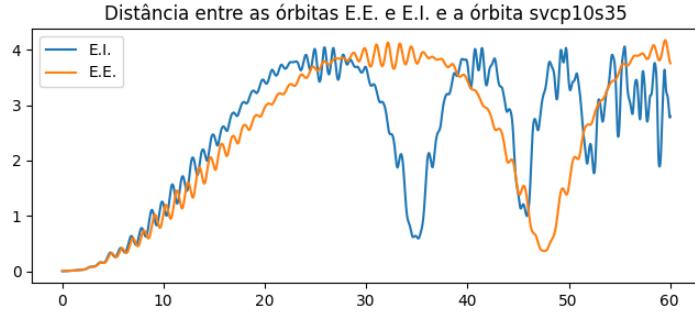


Figura 4.5: Distância no espaço de fases entre as soluções numéricas do problema-modelo A.1 com métodos de Euler explícito e implícito e o método svcp10s35 com $h = 10^{-3}$ no intervalo $[0, 60]$.

Um motivo para isso pode ser observado na figura 4.6. Uma vez que $E_0 - E$ decresce no método de Euler explícito, a energia total está aumentando, o que significa que a energia cinética está aumentando (ou que a potencial está diminuindo). Isso leva a um relaxamento do período e com aproximações mais violentas, e portanto ao menos uma partícula deve ser ejetada do sistema em sua evolução.

Já no caso implícito, $E_0 - E$ cresce, logo a energia total está diminuindo, então a energia potencial está aumentando (ou a energia cinética está diminuindo). Isso implica no encolhimento do período, e como o PNCG pode conter colisões o sistema fica numericamente instável.

Na prática, o método de Euler explícito “erra para mais”, expandindo a trajetória, enquanto o método de Euler implícito “erra para menos”, contraindo a trajetória.

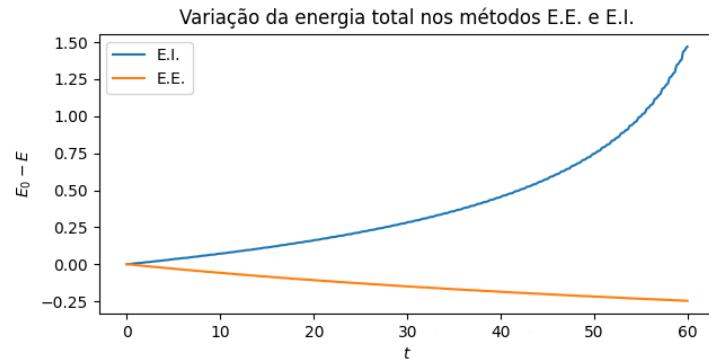


Figura 4.6: Variação (com sinal) da energia total em simulações do problema-modelo A.1 via métodos de Euler explícito e implícito e com $h = 10^{-3}$ no intervalo $[0, 60]$.

4.3 Integradores simpléticos

Como apresentado brevemente na introdução deste capítulo, os métodos simpléticos se baseiam na estrutura do espaço de fases, e não apenas na função que está sendo integrada. Nesse sentido, tais métodos são construídos de modo a preservarem a estrutura simplética dos problemas hamiltonianos, conservando o volume da solução e consequentemente conservando as integrais primeiras também.

Essas diferenças na forma e objetivo de construir os integradores entre os métodos tradicionais e os simpléticos têm implicações importantes sobre os resultados. Os métodos tradicionais são construídos tendo-se em vista uma estabilidade assintótica do sistema, imbuindo dissipações na solução numérica que distorcem as trajetórias de sistemas hamiltonianos, ainda que sejam aplicados integradores tradicionais de alta ordem, como exemplificado ao final da seção anterior. Isso não ocorre com integradores simpléticos, como apresentamos a seguir.

Para esta seção, no lugar de considerar um problema de Cauchy qualquer, tomaremos aqueles que podem ser escritos através das equações de Hamilton:

$$\dot{z}(t) = \Omega \nabla_z H(z), \quad z(0) = z_0, \quad z(t) = (\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)), \quad \Omega = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix}. \quad (4.20)$$

Como já apresentado no capítulo 2, o fluxo do problema (4.20) é *simplético*, ou seja, conserva o volume no espaço de fases. Em particular, isso significa que conserva também as integrais primeiras do sistema. A proposta dos *integradores simpléticos* é fornecer uma aplicação simplética Φ_h tal que

$$z_1 = \Phi_h(z_0).$$

Ademais, conforme o teorema 2.2.6, um critério para Φ_h ser simplética é ser tal que

$$D\Phi_h \Omega D\Phi_h^T = \Omega.$$

4.3.1 Obtenção de métodos via separação

Quando a função hamiltoniana é separável, ou seja, $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$, é possível obter métodos explícitos a partir do que segue. Tomando como hamiltoniano primeiramente apenas T e em seguida apenas V , temos os dois problemas de valor inicial respectivos:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}} = \nabla_{\mathbf{p}} T(\mathbf{p}) = \frac{1}{m} \mathbf{p}, \\ \dot{\mathbf{p}} = 0, \end{cases}, \quad \begin{cases} \dot{\mathbf{q}} = 0, \\ \dot{\mathbf{p}} = -\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) = \mathbf{F}(\mathbf{q}). \end{cases} \quad (4.21)$$

Em ambos os casos, podemos obter o fluxo de maneira explícita, uma vez que uma das coordenadas está constante:

$$\Phi_{\tau, T}(z) = \begin{bmatrix} \mathbf{q} + \tau \mathbf{p}/m \\ \mathbf{p} \end{bmatrix}, \quad \Phi_{\tau, V}(z) = \begin{bmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} + \tau \mathbf{F}(\mathbf{q}) \end{bmatrix}. \quad (4.22)$$

Se tomamos a aplicação composta $\Phi_\tau := \Phi_{\tau,T} \circ \Phi_{\tau,V}$, obtemos um primeiro método com semelhante familiar.

Método 4.3.1 (Euler Simplético (ou semi-implícito)). *Para um tamanho de passo h fixo em um intervalo discretizado para um problema de valor inicial hamiltoniano separável, temos a aproximação:*

$$\mathbf{q}_{k+1} = \mathbf{q}_k + h \frac{\mathbf{p}_{k+1}}{m}, \quad \mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{p}_k + h \mathbf{F}(\mathbf{q}_k). \quad (4.23)$$

Da mesma forma que os métodos de Euler explícito e implícito (métodos 4.2.1 e 4.2.2, respectivamente), o método de Euler simplético tem ordem 1 (HAIRER *et al.*, 2006, pg. 189). No entanto, trata-se de um método simplético, pois vale o critério matricial (Teorema 2.2.6):

$$D\Phi_h = \begin{bmatrix} 1 + \frac{h^2}{m} \nabla_q \mathbf{F}(\mathbf{q}) & \frac{h}{m} \\ h \nabla_q \mathbf{F}(\mathbf{q}) & 1 \end{bmatrix} \implies D\Phi_h \Omega D\Phi_h^T = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix} = \Omega.$$

A diferença entre os métodos pode ser observada aplicando-os no problema-modelo A.1, como na figura 4.7. Veja que embora todos os métodos de Runge-Kutta (com ordem maior que 1) comecem com uma variação menor de energia que o método de Euler simplético (com ordem 1), a variação do segundo é relativamente preservada, enquanto que a dos métodos RK escalona. No caso do RK44, embora a precisão seja mantida por mais tempo para $h = 0.05$, um tamanho de passo $h = 0.15$ permite visualizar melhor o erro na energia escalonando.

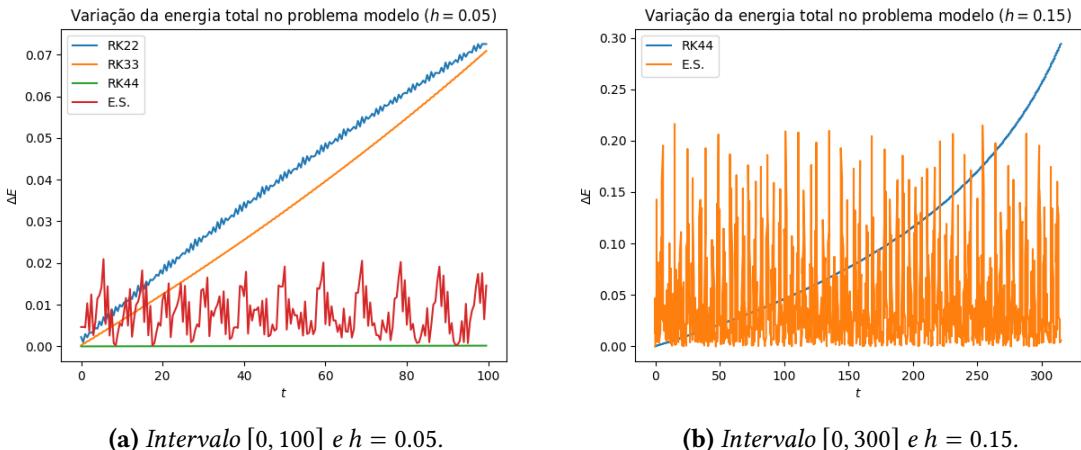


Figura 4.7: Variação da energia total na simulação do problema-modelo A.1 com os métodos RK22, RK33, RK44 e Euler Simples (E.S.)

A ideia de composição também pode ser aplicada para obter métodos com ordem mais alta. Tomando constantes de peso (isto é, que somam 1) c_1, \dots, c_s e d_1, \dots, d_s , tomamos a composição

$$\Phi_h = \Phi_{d_s h, V} \circ \Phi_{c_s h, T} \circ \dots \circ \Phi_{d_1 h, V} \circ \Phi_{c_1 h, T}.$$

Conforme LEIMKUHLER e REICH, 2005, pgs. 145–146, métodos Φ_h com esta forma são consistentes e, além disso, se os coeficientes são simétricos ($c_i = c_{s+1-i}$ e $d_i = d_{s+1-i}$), então

o método tem no mínimo ordem 2.

Método 4.3.2 (Velocity-Verlet). *Tomando os coeficientes $d_1 = d_2 = 1/2$, $c_1 = 0$ e $c_2 = 1$, obtemos um método consistente, simétrico, explícito, simplético e de segunda ordem dado por*

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{k+1} &= \mathbf{q}_k + h \frac{\mathbf{p}_k}{m} + \frac{h^2}{2m} \mathbf{F}(\mathbf{q}_k), \\ \mathbf{p}_{k+1} &= \mathbf{p}_k + \frac{h}{2} (\mathbf{F}(\mathbf{q}_k) + \mathbf{F}(\mathbf{q}_{k+1})). \end{aligned}$$

Teorema 4.3.1. *O método Velocity-Verlet é simplético.*

Demonstração. Seja $\Phi_h(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = (\mathbf{Q}(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \mathbf{P}(\mathbf{q}, \mathbf{p}))$. Então:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{q}} &= 1 + \frac{1}{2} \frac{h^2}{m} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}, & \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{p}} &= \frac{h}{m}, \\ \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{q}} &= \frac{h}{2} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}} \left(1 + \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{q}} \right), & \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{p}} &= \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{q}}. \end{aligned}$$

Nesse caso, a condição do teorema 2.2.6 é facilmente verificada:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{q}} = \left(\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{q}} \right)^2 - \left(\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{q}} - 1 \right) \left(1 + \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{q}} \right) = 1.$$

□

Outros dois métodos de ordens 3 e 4 foram propostos, respectivamente, por **RUTH**, 1983 e por **FOREST** e **RUTH**, 1990.

Método 4.3.3 (Ruth 3). *Um método simplético de 3^a ordem é obtido através dos coeficientes*

$$\begin{aligned} c_1 &= 1, & c_2 &= -2/3, & c_3 &= 2/3, \\ d_1 &= -1/24 & d_2 &= 3/4, & d_3 &= 7/24. \end{aligned}$$

Método 4.3.4 (Ruth 4). *Um método simplético de 4^a ordem é obtido através dos coeficientes*

$$\begin{aligned} c_1 = c_4 &= \frac{1}{2(2 - 2^{1/3})}, & c_2 = c_3 &= \frac{1 - 2^{1/3}}{2(2 - 2^{1/3})}, \\ d_1 = d_3 &= \frac{1}{2 - 2^{1/3}}, & d_2 &= -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, & d_4 &= 0. \end{aligned}$$

4.3.2 Métodos via composição de integradores de segunda ordem

Seguindo nessa linha, **YOSHIDA**, 1990 observa que uma forma eficiente de obter métodos de alta ordem para problemas com funções hamiltonianas separáveis é através da composição de métodos simétricos de segunda ordem. A facilidade vem dos termos ímpares da expansão de Taylor se anularem, o que simplifica as condições de ordem do método, e

procurar por métodos de ordem par é conveniente uma vez que os métodos simétricos sempre têm ordem par e são reversíveis no tempo (LEIMKUHLER e REICH, 2005, pg. 147). Vale ressaltar que a composição de simplectomorfismos é também simplectomorfa, o que significa que compôr métodos de Verlet, por exemplo, com uma boa escolha de pesos, fornece integradores simpléticos, simétricos, consistentes e de alta ordem. Nesse caso, as aplicações compostas Ψ_h têm a forma

$$\Psi_h = \Phi_{\gamma_s h} \circ \dots \circ \Phi_{\gamma_2 h} \circ \Phi_{\gamma_1 h},$$

onde $\Phi_{\gamma_i h}$ é o método de Verlet (4.3.2) com tamanho de passo $\gamma_i h$, para $i = 1, 2, \dots, s$. Dois métodos deste tipo foram implementados no programa final, com ordens 8 e 10.

Método 4.3.5 (svcp8s15). (HAIRER et al., 2006, pg. 157) *Um método Stormer-Verlet Composto de 8^a ordem e 15 estágios (svcp8s15) é obtido através dos coeficientes:*

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \gamma_{15} &= 0.74167036435061295344822780 \\ \gamma_2 &= \gamma_{14} &= -0.40910082580003159399730010 \\ \gamma_3 &= \gamma_{13} &= 0.19075471029623837995387626 \\ \gamma_4 &= \gamma_{12} &= -0.57386247111608226665638773 \\ \gamma_5 &= \gamma_{11} &= 0.29906418130365592384446354 \\ \gamma_6 &= \gamma_{10} &= 0.33462491824529818378495798 \\ \gamma_7 &= \gamma_9 &= 0.31529309239676659663205666 \\ \gamma_8 &= \gamma_8 &= -0.79688793935291635401978884 \end{aligned}$$

Método 4.3.6 (svcp10s35). (HAIRER et al., 2006, pg. 158) *Um método Stormer-Verlet Composto de 10^a ordem e 35 estágios (svcp10s35) é obtido através dos coeficientes:*

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \gamma_{35} &= 0.07879572252168641926390768 \\ \gamma_2 &= \gamma_{34} &= 0.31309610341510852776481247 \\ \gamma_3 &= \gamma_{33} &= 0.02791838323507806610952027 \\ \gamma_4 &= \gamma_{32} &= -0.22959284159390709415121340 \\ \gamma_5 &= \gamma_{31} &= 0.13096206107716486317465686 \\ \gamma_6 &= \gamma_{30} &= -0.26973340565451071434460973 \\ \gamma_7 &= \gamma_{29} &= 0.07497334315589143566613711 \\ \gamma_8 &= \gamma_{28} &= 0.11199342399981020488957508 \\ \gamma_9 &= \gamma_{27} &= 0.36613344954622675119314812 \\ \gamma_{10} &= \gamma_{26} &= -0.39910563013603589787862981 \\ \gamma_{11} &= \gamma_{25} &= 0.10308739852747107731580277 \\ \gamma_{12} &= \gamma_{24} &= 0.41143087395589023782070412 \\ \gamma_{13} &= \gamma_{23} &= -0.00486636058313526176219566 \\ \gamma_{14} &= \gamma_{22} &= -0.39203335370863990644808194 \\ \gamma_{15} &= \gamma_{21} &= 0.05194250296244964703718290 \\ \gamma_{16} &= \gamma_{20} &= 0.05066509075992449633587434 \\ \gamma_{17} &= \gamma_{19} &= 0.04967437063972987905456880 \\ \gamma_{18} &= \gamma_{18} &= 0.04931773575959453791768001 \end{aligned}$$

Apesar da relativa facilidade de obter métodos simpléticos através de composição de métodos de primeira e de segunda ordem, é fácil ver pelos métodos 4.3.5 e 4.3.6 que é necessária uma quantidade de estágios muito maior do que a ordem do método, o que

torna a usabilidade dos métodos cada vez mais desafiadora. Porém, existem muitos outros métodos simpléticos e que não são baseados em composição. Dois tipos bastante comuns são os métodos de Runge-Kutta Simpléticos e os métodos de Runge-Kutta-Nyström.

4.3.3 Métodos de Runge-Kutta Simpléticos e de Runge-Kutta-Nyström

Para obter um método de Runge-Kutta simplético basta adicionar uma restrição (além das já apresentadas anteriormente) sobre o método 4.2.4.

Teorema 4.3.2. *Se os coeficientes de um método de Runge-Kutta de R estágios são tais que*

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

então trata-se de um método simplético.

A demonstração do teorema pode ser encontrada em **LEIMKUHLER e REICH, 2005**, pgs. 152–154. O importante neste momento é que decorre do teorema que para $i = j$ temos

$$2a_{ii} = b_i, \quad \forall i = 1, 2, \dots, R.$$

Uma vez que o vetor \mathbf{b} não é nulo, isso significa que a matriz de coeficientes \mathbf{A} tem diagonal não-nula, e portanto não é possível obter um integrador de Runge-Kutta simplético que seja explícito. Tendo em vista as já mencionadas dificuldades de se trabalhar computacionalmente com métodos implícitos, nenhum método de Runge-Kutta simplético foi testado neste trabalho.

Já os métodos de Runge-Kutta-Nyström (RKN) são voltados especificamente para problemas de valor inicial do tipo

$$\ddot{\mathbf{x}} = g(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}),$$

então são aplicáveis para grande parte dos problemas de mecânica hamiltoniana, como o PNCG. O método geral é dado pelo que segue.

Método 4.3.7 (Runge-Kutta-Nyström de s estágios). (**HAIRER et al., 2006**, pg. 41) *Um método RKN de s estágios para um sistema hamiltoniano separável em T e V é dado por*

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_i &= \mathbf{q}_k + c_i h \frac{\mathbf{p}_k}{m} + h^2 \sum_{j=1}^s a_{ij} \frac{\mathbf{F}(\mathbf{y}_i)}{m}, \quad i = 1, 2, \dots, s, \\ \mathbf{q}_{k+1} &= \mathbf{q}_k + h \frac{\mathbf{p}_k}{m} + h^2 \sum_{i=1}^s b_i \frac{\mathbf{F}(\mathbf{y}_i)}{m}, \\ \mathbf{p}_{k+1} &= \mathbf{p}_k + h \sum_{i=1}^s B_i \mathbf{F}(\mathbf{y}_i), \end{aligned}$$

para constantes $\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ e B_1, \dots, B_s .

Da mesma forma que para os métodos de Runge-Kutta, um método RKN é explícito se $a_{ij} = 0$ para $j \geq i$. Porém, existem critérios para que um método RKN explícito seja

simplético (OKUNBOR e SKEEL, 1994, pg. 376):

$$b_i = B_i(1 - c_i), \quad 1 \leq i \leq s, \quad (4.24)$$

$$a_{ij} = B_j(c_i - c_j), \quad j < i. \quad (4.25)$$

Dessa forma, foi possível testar métodos de Runge-Kutta-Nyström simpléticos e explícitos. Os escolhidos para teste constam em OKUNBOR e SKEEL, 1994 e são como segue. O número 1 sufixado ao nome dos métodos indica que, em referência às tabelas 1 e 2 de Okunbor e Skeel, tratam-se do método 1. O método RKN551 foi escolhido entre os 4 sem critérios, e o RKN671 foi escolhido por ter o menor resíduo entre os apresentados pelos autores.

Método 4.3.8 (RKN551). Um método RKN de 5^a ordem e 5 estágios simplético e explícito é dado pelos seguintes coeficientes:

B_i	c_i
-1.67080892327314312060	0.69491389107017931259
1.22143909230997538270	0.63707199676998338411
0.08849515813253908125	-0.02055756998211598005
0.95997088013770159876	0.79586189634575355001
0.40090379269297793385	0.30116624272377778837

Método 4.3.9 (RKN671). Um método RKN de 6^a ordem e 7 estágios simplético e explícito é dado pelos seguintes coeficientes:

B_4	0.26987577187133640373
$B_5 = B_3$	0.92161977504885189358
$B_6 = B_2$	0.13118241020105280626
$B_7 = B_1$	-0.68774007118557290171
c_4	0.50000000000000000000000000000000
$c_5 = 1 - c_3$	0.06520862987680341024
$c_6 = 1 - c_2$	0.65373769483744778901
$c_7 = 1 - c_1$	0.05586607811787376572

4.3.4 Comparações entre os métodos apresentados

A mesma ideia de verificação de ordem para os métodos tradicionais pode ser aplicada para os métodos simpléticos, como é apresentado na tabela 4.9. Os integradores com ordem maior que 6 geram resultados muito parecidos mesmo para os valores de h relativamente grandes utilizados na tabela e mesmo quando se utiliza precisão de 128 bits, então não pudemos verificar sua precisão com este método.

Vale também observar a diferença na conservação da energia entre cada método simplético, pois métodos de ordem maior conservam a energia também em maior ordem. Aplicando o problema-modelo A.1 para cada método apresentado, obtemos a figura 4.8.

Um ponto importante sobre os métodos simpléticos é que, como já dito, estes conservam não apenas a energia total, mas todas as integrais primeiras. Porém, a energia total é

h	E. S.	Verlet	Ruth3	Ruth4	RKN551	RKN671
1/10	1.129548	1.904978	3.567326	3.398327	5.367215	5.392546
1/20	1.057072	1.974542	3.659927	3.840014	5.869322	5.836890
1/40	1.021997	1.993517	3.540536	3.959375	5.998531	5.958402
1/80	1.008801	1.998372	3.361093	3.989805	5.948801	5.989673
1/160	1.003795	1.999592	3.208686	3.997449	5.588236	6.003132

Tabela 4.9: Convergência dos métodos no problema modelo A.1.

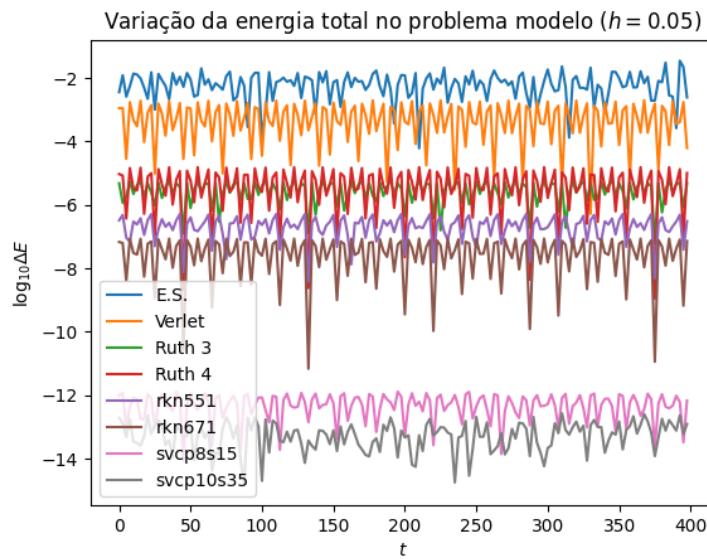


Figura 4.8: Variação da energia total para os métodos simpléticos apresentados. O problema-modojo A.1 foi integrado no intervalo $[0, 400]$ com tamanho de passo $h = 0.05$.

calculada através das velocidades e das distâncias entre os corpos, e corpos muito próximos geram instabilidade numérica no sentido de facilitarem o aparecimento de erros de ponto flutuante, enquanto as outras quantidades conservadas baseiam-se somente em operações lineares ou vetoriais diretas, sem a possibilidade de singularidades. A implicação prática disso é que as outras integrais primeiras são muito melhor conservadas que a energia total, como pode ser observado na figura 4.9, na qual as outras integrais primeiras de um problema de 25 corpos possuem erro abaixo de 10^{-11} . Dessa forma, é coerente analisar erros numéricos focando-se principalmente na energia.

4.4 Corretor numérico

Uma alternativa (ou complemento) ao uso de integradores simpléticos é utilizar integradores tradicionais e aplicar algum tipo de correção a cada passo, de modo a garantir que a solução aproximada conserve as integrais primeiras. O método apresentado nesta seção tem esse propósito, e, embora aqui tenha sido desenvolvido intuitivamente, este foi proposto inicialmente por **NACOZY, 1972** e posteriormente analisado por **SHAMPINE, 1986**.

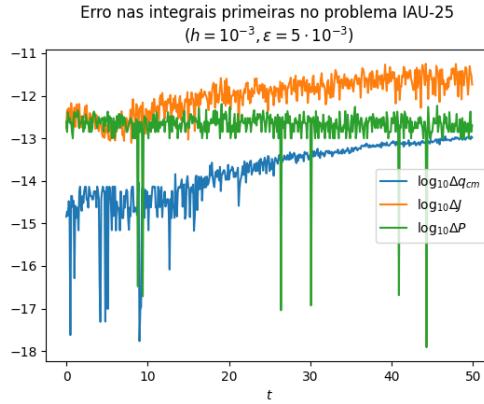


Figura 4.9: Variação das integrais primeiras do PNCG na simulação do problema IAU-25 (A.2) via método de Euler Simplético com tamanho de passo $h = 10^{-3}$ e amortecimento $\epsilon = 10^{-3}$. Aqui $\Delta f = \|f\| - \|f_0\|$.

Sejam $z = (q, p)$ um vetor no espaço de fases para um problema de N partículas (não necessariamente o PNCG) e $z_0 = (q_0, p_0)$ o valor inicial de um Problema de Cauchy conservativo

$$\dot{z}(t) = F(t, z(t)), \quad z(t_0) = z_0,$$

com F suave. Seja também $\Psi(z) = (\psi_1(z), \dots, \psi_k(z))$ um conjunto de k integrais primeiras para o problema, sendo $\Psi_0 = \Psi(z_0)$.

Tome um instante $t \in I$, sendo I o intervalo maximal do problema, e considere a solução exata $z^* = z(t)$ e a solução aproximada \tilde{z} , obtida através de um integrador numérico qualquer. Espera-se de uma boa simulação conservativa que z seja solução de

$$\begin{aligned} \min \quad & \|\tilde{z} - z^*\| \\ \text{s. a} \quad & \psi_i(z^*) = \psi_i(z_0) \\ & i = 1, \dots, k. \end{aligned} \tag{4.26}$$

Como o que se tem é \tilde{z} , podemos analisar em função de z^* .

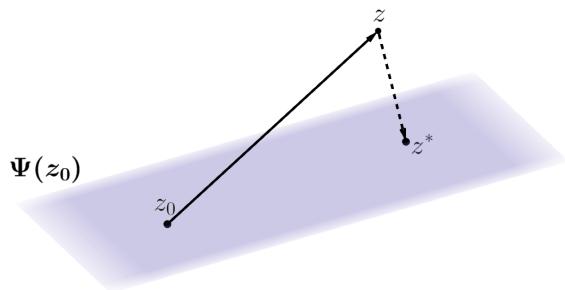


Figura 4.10: Representação visual do corretor numéricico.

Tome uma função $f(x) = \frac{1}{2} \|\tilde{z} - x\|^2$, cujo problema de otimização é equivalente a (4.26). O processo se torna o método de quadrados mínimos. Tome y um candidato a mínimo do problema. As condições necessárias de otimização para o problema implicam

que nesse caso (FRIEDLANDER, 1994):

$$\nabla f(\mathbf{y}) = \tilde{\mathbf{z}} - \mathbf{y} = \sum_{i=1}^k \alpha_i \nabla \psi_i(\mathbf{y}) = D\Psi(\mathbf{y})^T \boldsymbol{\alpha}, \quad \boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_k), \quad (4.27)$$

onde $D\Psi(\mathbf{y})$ é a matriz jacobiana do campo vetorial de integrais primeiras e $\boldsymbol{\alpha}$ é o vetor de multiplicadores de Lagrange. Observe que a função objetivo f é uma função convexa, e logo a condição necessária é também suficiente para o problema. Por Taylor, tem-se que

$$\Psi(\tilde{\mathbf{z}}) \approx \Psi(\mathbf{y}) + D\Psi(\mathbf{y})(\tilde{\mathbf{z}} - \mathbf{y}),$$

o que pela equação (4.27) pode ser escrito como:

$$D\Psi(\mathbf{y})D\Psi(\mathbf{y})^T \boldsymbol{\alpha} \approx \Psi(\tilde{\mathbf{z}}) - \Psi(\mathbf{y}) = \Psi(\tilde{\mathbf{z}}) - \Psi(z_0). \quad (4.28)$$

Resolvendo (4.28) obtém-se os multiplicadores de Lagrange, que podem ser substituídos em (4.27):

$$\mathbf{y} = \tilde{\mathbf{z}} - D\Psi(\mathbf{y})^T \boldsymbol{\alpha} \approx \mathbf{z}^*.$$

Dessa forma, ainda que seja utilizado um método tradicional, é possível obter uma solução que preserve *razoavelmente* as integrais primeiras. Essa *razoabilidade* está ligada com o tamanho de passo h escolhido da maneira como segue.

Considere um problema local no instante t_n dado por

$$\dot{\mathbf{u}}(t) = F(t, \mathbf{u}(t)), \quad \mathbf{u}(t_n) = \mathbf{z}_n^*,$$

onde \mathbf{z}_n é uma aproximação para o problema original no instante t_n que satisfaz as integrais primeiras. Um tamanho de passo h está relacionado a um erro local τ de modo que

$$\|\mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{z}_{n+1}\| \leq \tau.$$

Tomando uma aproximação corrigida \mathbf{z}_{n+1}^* , observe que

$$\begin{aligned} \|\mathbf{z}(t_{n+1}) - \mathbf{z}_{n+1}^*\| &= \|\mathbf{z}(t_{n+1}) - \mathbf{u}(t_{n+1}) + \mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{z}_{n+1} + \mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_{n+1}^*\| \\ &\leq \|\mathbf{z}(t_{n+1}) - \mathbf{u}(t_{n+1})\| + \|\mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{z}_{n+1}\| + \|\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_{n+1}^*\| \\ &\leq \zeta_h + \tau + \mu, \end{aligned}$$

onde ζ_h limita a norma de $\mathbf{z}(t_{n+1}) - \mathbf{u}(t_{n+1})$ e $\mu = \|\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_{n+1}^*\|$. A constante ζ_h é garantida por f ser Lipschitz com constante L :

$$\|\mathbf{z}(t_{n+1}) - \mathbf{u}(t_{n+1})\| \leq e^{hL} \|\mathbf{z}(t_n) - \mathbf{z}_n^*\| = \zeta_h.$$

Quanto à μ , se garantida sua existência como constante, então aplicar a correção sobre uma aproximação com erro τ possui um erro de discretização equivalente a não aplicar a correção sobre uma aproximação de erro $\tau + \mu$.

Observe que $\mathbf{u}(t)$ satisfaz as integrais primeiras, pois seu valor inicial \mathbf{z}_n^* as satisfaz. Em particular $\mathbf{u}(t_{n+1}) = \mathbf{z}_{n+1}^*$ satisfaz, e logo a correção é tal que $\mu = \tau$, o que significa que

aplicá-la sobre uma aproximação de ordem p fornece uma aproximação corrigida também de ordem p . Dessa forma, o corretor preserva a ordem do integrador.

Quanto à aplicação computacional, algumas questões merecem ser tratadas, e constam na seção 5.4.

Capítulo 5

Implementação e aplicações

O objetivo deste último capítulo é a aplicação da teoria apresentada. Começando pela implementação computacional, discutimos a escolha da linguagem de programação Fortran e a estrutura do programa final. Passamos então para as questões de valores iniciais, apresentando o método utilizado para condicionar as integrais primeiras.

A questão das colisões vem em seguida, pois existem outras formas computacionais de lidar com singularidades e aproximações intensas no PNCG além da inclusão de colisões perfeitamente elásticas.

Algumas questões sobre o corretor numérico apresentado na seção 4.4 também precisam ser discutidas, como o seu uso e seu custo de computação associado. Além disso, este envolve a resolução de um sistema de equações (para mais de uma integral primeira em consideração), então foi necessário escolher um método de resolução adequado.

Por fim, apresentamos algumas simulações de muitos corpos e com condições iniciais específicas para testar os resultados da Dinâmica de Formas enunciados na seção 3.6.

Todas as simulações e testes realizados neste trabalho foram aplicados em um computador de mesa (não dedicado) com processador *Intel Core i5 CPU 760 @ 2.80GHz* e com 16 GB de RAM.

5.1 Ferramentas

5.1.1 Escolha da linguagem de programação

Como dito brevemente, a necessidade de muitas operações computacionalmente custosas com agilidade exigiu a escolha de uma linguagem de programação que fosse potente por natureza.

Linguagens como o Python possuem excelentes bibliotecas voltadas para a computação científica, como o *NumPy* e o *SciPy*, além de bibliotecas de otimização de processamento como o *Numba*. Porém, estas no geral são linguagens de programação denominadas *interpretadas*, pois não têm seu código explicitamente compilado, o que no geral as torna mais lentas que linguagens explicitamente compiladas, como C, Java ou Fortran.

Vale ressaltar que um código em Python que utilize corretamente as bibliotecas mencionadas pode de fato ser mais rápido que um código não otimizado em alguma linguagem compilada. Ainda assim, o esforço necessário para isso é considerável, e neste trabalho foi escolhido o caminho de explorar a linguagem compilada *Fortran*.

O Fortran, acrônimo de *IBM Mathematical FORmula TRANslation System*, é uma linguagem de programação compilada criada na década de 1950 com o objetivo de ser aplicada em computação científica. Apesar de ser uma linguagem antiga, seu desenvolvimento continua e o Fortran se mantém sendo a principal linguagem utilizada para computação científica até hoje, presente, por exemplo, no NumPy e no SciPy (HARRIS *et al.*, 2020; VIRTANEN *et al.*, 2020).

Existem diversas bibliotecas de Fortran voltadas para computação científica. Neste trabalho foram utilizadas duas delas: *OpenMP* e o *OpenBLAS*. A primeira é uma biblioteca para computação paralela, e será explorada com mais delalhes na subseção 5.1.4.

Já o *OpenBLAS* é uma biblioteca otimizada de *BLAS* (*Basic Linear Algebra Subprograms*) e *LAPACK* (*Linear Algebra Package*), dois conjuntos de subrotinas voltadas para álgebra linear numérica. A documentação de ambos pode ser encontrada, respectivamente, em PROJECT, 2024 e ANDERSON *et al.*, 1999.

Vale ressaltar que existem também bibliotecas voltadas para a integração numérica, com métodos de alta ordem e otimizados. Porém, como o propósito deste trabalho também foi aprender a implementá-los manualmente, estas não foram utilizadas.

O repositório com o código desenvolvido pode ser acessado no endereço <https://github.com/potalej/gravidade-fortran> (POTALEJ, 2024).

5.1.2 Estrutura do programa

O programa final é dividido em algumas sub-rotinas que são chamadas por um módulo central, o `simulacao`. As sub-rotinas principais são:

- `simulacao`: Um módulo central `simulacao` é utilizado como base para os dois módulos de simulação, o `simulacao_vie` e o `simulacao_sorteio`, para simulações com valores iniciais explícitos e simulações com sorteio de condições iniciais, respectivamente.
- `integrador`: Um módulo pai o qual todos os integradores estendem, contendo rotinas para integração e para o cálculo de forças.
- `mecanica`: Sub-rotinas de mecânica.
- `correcao`: Sub-rotinas do corretor numérico.
- `colisao`: Sub-rotinas das colisões perfeitamente elásticas.
- `forcas`: Sub-rotinas de forças, sendo uma sequencial e uma paralelizada.
- `condicoesIniciais`: Sub-rotinas para a geração aleatória e condicionamento de valores iniciais.
- `arquivos e leitura`: Sub-rotinas para a manipulação de arquivos.

- `plot`: Sub-rotinas para exibição de trajetórias utilizando o *GNUPlot*.

Todos os métodos de integração numérica implementados foram apresentados explicitamente neste trabalho no capítulo 4. Os métodos disponíveis e testados até este trabalho constam na tabela 5.1.

Módulo	Nome ou Tipo	Ordem	Estágios	Referência
<code>euler</code>	Euler Explícito	1	1	4.2.1
<code>euler_imp</code>	Euler Implícito	1	1	4.2.2
<code>rungekutta2</code>	Runge-Kutta	2	2	4.2.5
<code>rungekutta3</code>	Runge-Kutta	3	3	4.2.6
<code>rungekutta4</code>	Runge-Kutta	4	4	4.2.7
<code>eulersimp</code>	Euler Simplético	1	1	4.3.1
<code>verlet</code>	Velocity-Verlet	2	2	4.3.2
<code>ruth3</code>	Ruth	3	3	4.3.3
<code>ruth4</code>	Ruth	4	4	4.3.4
<code>rkn551</code>	Runge-Kutta-Nyström	5	5	4.3.8
<code>rkn671</code>	Runge-Kutta-Nyström	6	7	4.3.9
<code>svcp8s15</code>	Stormer-Verlet Composto	8	15	4.3.5
<code>svcp10s35</code>	Stormer-Verlet Composto	10	35	4.3.6

Tabela 5.1: Integradores numéricos implementados.

5.1.3 Precisão e erros de ponto flutuante

Os computadores armazenam números como uma quantidade finita de *dígitos binários*, os *bits*. Isso significa que todo número inteiro é armazenado exatamente como é, e todo número real α é armazenado na representação de *ponto flutuante*, no qual a mantissa do número é recortada para uma quantidade finita de dígitos.

Existem diversas formas de representação de ponto flutuante, mas a maioria dos processadores modernos segue o padrão internacional IEEE 754-185, no qual há diversos padrões de ponto flutuante. Os principais são os de 32 *bits*, os de 64 *bits* e os de 128 *bits*. O *float*, tipo dedicado para valores reais no Python, utiliza o padrão de 64 *bits*. Já o *real*, análogo do *float* mas para Fortran, utiliza o de 32.

Para ver a diferença entre os tipos, podemos buscar o menor ϵ positivo tal que $1.0 + \epsilon \neq 1.0$, utilizando a *aritmética de ponto flutuante*. Utilizando o Fortran, para o tipo *real* padrão temos $\epsilon = 6.0 \cdot 10^{-8}$, enquanto que para o *real64* temos $\epsilon = 1.1 \cdot 10^{-16}$ e para o *real128* temos $\epsilon = 1.0 \cdot 10^{-34}$. Na prática, isso significa que a *precisão* de cada tipo, ou seja, quantas casas decimais podem ser levado em conta ao final de um programa, é, respectivamente, 7, 15 e 33.

Como o PNCG é um problema com momentos de instabilidade numérica, como quando ocorrem aproximações intensas, os resultados mais numericamente interessantes precisam ser pelo menos do tipo *real64*. Tipos com mais *bits* são computacionalmente custosos para cálculos, então optamos por utilizar o padrão *real64*.

A figura 5.1 contém uma comparação das variações da energia total para diferentes tipos de *float*. Vale observar que neste exemplo, a duração da simulação para *real32*, *real64* e *real128* foi, respectivamente, 0.27, 0.39 e 15.62 segundos.

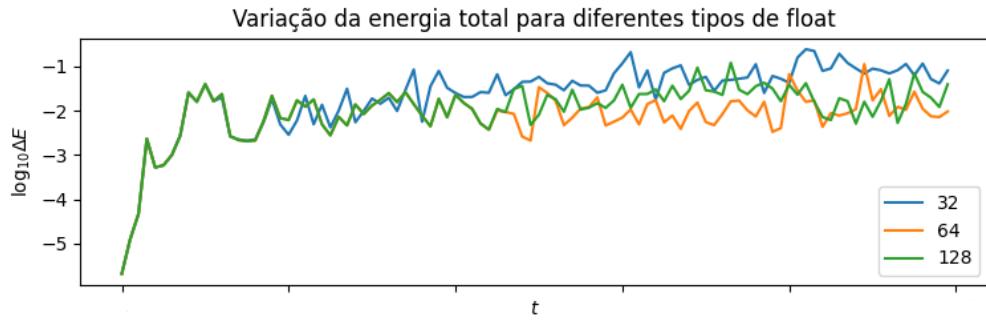


Figura 5.1: Variação da energia total no problema-modelo A.2 via método Ruth4 com $h = 10^{-2}$ e $\epsilon = 5h$ no intervalo $[0, 500]$ para floats com 32, 64 e 128 bits.

5.1.4 Paralelização

Como mencionado anteriormente, foi utilizada uma biblioteca de Fortran para computação paralela, a *OpenMP* (*Open Multi-Processing*). Enquanto um código serial realiza uma operação por vez, um código paralelo é capaz de realizar mais de um cálculo ao mesmo tempo, como na figura 5.2. No caso do PCNG, existem algumas possibilidades para a aplicação: o cálculo do potencial e das forças, o cálculo da matriz normal utilizada no corretor numérico (ver equação (5.14)) e na detecção de colisões.

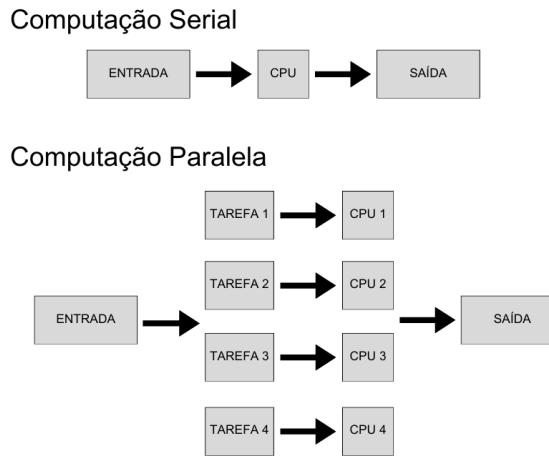


Figura 5.2: Visualização dos conceitos de computação serial e paralela.

Exemplificando com o primeiro caso, foram implementadas duas funções de cálculo de forças: `forcas_seq` e `forcas_par`¹. O núcleo do cálculo sequencial é feito da seguinte maneira:

¹ O código completo consta em POTALEJ, 2024.

```

1   DO a = 2, N
2     DO b = 1, a - 1
3     ...
4       Fab = G * m(a) * m(b) * (Rab) * distancia_inv
5       forcas_seq(a,:) = forcas_seq(a,:) + Fab
6       forcas_seq(b,:) = forcas_seq(b,:) - Fab
7     END DO
8   END DO

```

Programa 5.1: Código central da função sequencial de forças.

O valor `distancia_inv` é o cubo do inverso da distância euclidiana entre os corpos, e R_{ab} é o vetor $\mathbf{q}_b - \mathbf{q}_a$. Observe como os *loops* com `DO` caracterizam a ordem quadrática dos cálculos. A proposta da paralelização neste caso está em dividir o cálculo da força para cada corpo entre os *CPUs*, e posteriormente somar o resultado em um único vetor. Para isso, a biblioteca OpenMP permite definir variáveis compartilhadas (`SHARED`, com as forças totais) e variáveis privadas (`PRIVATE`, variáveis locais), o que garante que nenhuma CPU sobrescreva o vetor de forças das outras CPUs. A função paralelizada é semelhante à sequencial:

```

1   forcas_par(:,:) = 0
2
3   !$OMP PARALLEL SHARED(forcas_par) PRIVATE(forcas_local, ...)
4     forcas_local(:,:) = 0
5     !$OMP DO
6       DO a = 2, N
7         DO b = 1, a-1
8         ...
9           Fab = G * m(a) * m(b) * Rab * distancia_inv
10          forcas_local(a,:) = forcas_local(a,:) + Fab
11          forcas_local(b,:) = forcas_local(b,:) - Fab
12        END DO
13      END DO
14    !$OMP END DO
15
16    !$OMP CRITICAL
17      forcas_par = forcas_par + forcas_local
18    !$OMP END CRITICAL
19  !$OMP END PARALLEL

```

Programa 5.2: Código central da função paralelizada de forças.

Na figura 5.3 apresentamos um histograma em escala logarítmica com o tempo de computação (em segundos) para diferentes valores de N com o método de Verlet e sem o uso de correção e de colisões, para garantir que o tempo esteja ligado diretamente com o cálculo das forças e do potencial. É possível observar que a diferença é expressiva para valores de N a partir da centena, embora o cenário seja o oposto para valores de N pequenos, uma vez que o custo de distribuir os cálculos entre os núcleos é maior que o do cálculo sequencial.

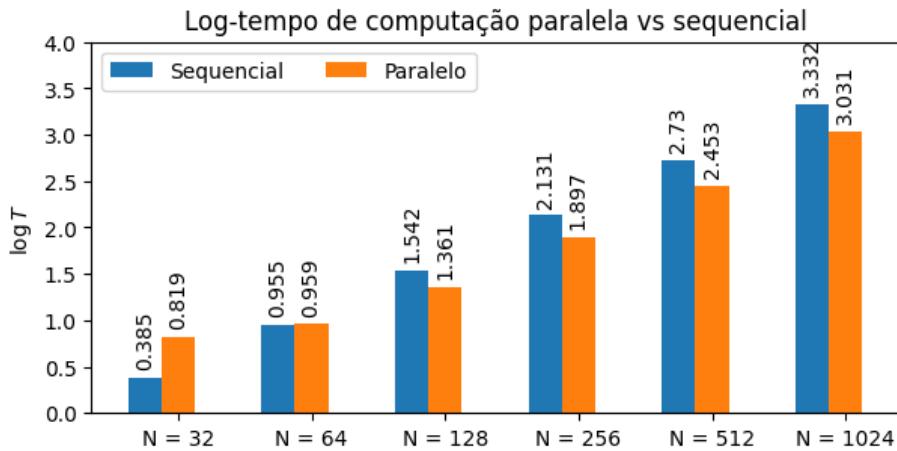


Figura 5.3: Log-tempo de computação paralela e computação sequencial para diferentes valores de N e integração com método de Verlet, sem correção e sem colisão. Foram disponibilizados 4 núcleos para a paralelização.

5.1.5 Entrada e saída de dados

Era objetivo que o programa final não contivesse somente simulações, mas facilitasse a geração de valores iniciais e a visualização dos dados também. Nesse sentido, há algumas opções disponíveis para a execução do programa, conforme tabela 5.2.

<code>-sv, --sorteio-salvar</code> <code>-s, --sorteio</code> <code>-vi, --valores-iniciais</code> <code>-e, --exibir</code> <code>-d, --dados</code>	Sorteio de valores iniciais apenas Sorteio de valores iniciais e simulação Simulação a partir de valores iniciais definidos Exibição de trajetórias de uma simulação Exibição de dados de simulação
---	---

Tabela 5.2: Opções de entrada no programa final.

Existem também alguns tipos de arquivos diferentes utilizados pelo programa, os quais vale mencionar, conforme tabela 5.3. Os arquivos do tipo 1 não são gerados, pois são o tipo mais simples, contendo informações como quantidade de corpos, valor das integrais primeiras, métodos *etc*, sem definir valores iniciais explícitos.

1.	<i>Preset</i> para sorteio
2.	<i>Preset</i> de valores iniciais
3.	Informações de simulação (<i>info.txt</i>)
4.	Dados de simulação (<i>data.csv</i>)

Tabela 5.3: Arquivos utilizados ou gerados pelo programa.

Os arquivos do tipo 1. podem ser usados para gerar valores iniciais explícitos através das chamadas `-sv` e `-s`, que têm entre as saídas um arquivo do tipo 2. Um exemplo de entrada consta no repositório do programa no diretório de *presets*. Existem duas opções para a geração de valores iniciais: o sorteio *comum* e o sorteio de *Hénon*. No primeiro caso,

apenas as integrais primeiras são condicionadas conforme o valor desejado. No segundo, são aplicadas as condições de Hénon, conforme descrito na seção 5.2.

Já os arquivos de tipo 2 podem ser utilizados para as chamadas `-vi`. Tais arquivos contêm configurações da simulação, como método, tamanho de passo e afins, e também os valores iniciais explícitos. O uso de tais arquivos facilita os testes com diferentes métodos para os mesmos valores iniciais.

Os arquivos de tipo 3 são gerados por simulações em ambas as chamadas `-sv` e `-vi`. Estes contêm informações acerca da simulação em si e de seu desempenho, podendo ser utilizados para comparações entre diferentes métodos. Por não ser um arquivo de entrada, é o que detém mais liberdade para conter diferentes informações. Um exemplo de arquivo de tipo 3 consta no programa 5.3.

```

1  # gravidade-fortran v0.1
2
3  # configuracoes
4  -- corpos: 1000
5  -- metodo: verlet
6  -- G: 1.0000000000000000
7  -- h: 0.4000000000000001E-1
8  -- potsoft: 0.4000000000000001E-1
9  -- passos por instante: 10
10 -- passos: 25000
11 -- t0: 0
12 -- t1: 100
13 -- paralelisacao: T
14 -- correcao: F
15 -- correcao margem erro: 0.1000000000000000E-2
16 -- correcao max num tent.: 1
17 -- colisoes: F
18 -- colisoes max. dist.: 0.01
19
20 # simulacao:
21 -- duracao: 35.480001091957092

```

Programa 5.3: Exemplo de saída do arquivo de informações.

Por fim, os arquivos de tipo 4 contêm a constante G , o tamanho do passo, as massas, e as posições e momentos lineares no decorrer da simulação, armazenados no formato (x, y, z, p_x, p_y, p_z) . Tais arquivos têm o formato `.csv` (*comma-separated values*). Esta não é a forma mais eficiente de armazenar dados do tipo, uma vez que a escrita de arquivos pelo Fortran é computacionalmente custosa e os arquivos ficam pesados. Para lidar com isso, existem tipos de arquivo mais eficientes, como o HDF², mas por dificuldades técnicas e a facilidade de manipulação de CSV, a opção mais lenta foi escolhida.

5.2 Valores iniciais

O programa foi elaborado de modo que é possível entrar com valores iniciais de duas maneiras: diretamente e através de sorteios. Da primeira forma, é necessário informar cada

² Hierarchical Data Format. Para mais detalhes, veja: <https://www.hdfgroup.org/solutions/hdf5/>.

massa, posição e momento linear inicial para cada corpo, o que é prático para problemas de poucos corpos mas inviável, a priori, conforme N cresce, sendo necessário utilizar da segunda forma. Vale ressaltar que o sorteio também gera um arquivo de valores iniciais, então a primeira forma pode ser utilizada a posteriori.

Para gerar valores iniciais aleatórios é preciso escolher critérios que atendam as necessidades do problema que se objetiva simular. Para além de gerar valores utilizando, por exemplo, uma distribuição uniforme, muitas vezes é necessário também condicionar os valores gerados de modo que atendam determinada demanda, como os valores das integrais primeiras ou critérios iniciais para um sistema poder ser estável ou não. Tratamos esses dois casos a seguir.

5.2.1 Condicionamento das integrais primeiras

Considere valores iniciais $(\mathbf{m}, \mathbf{q}, \mathbf{p}) \in \mathbb{R}_+^N \times \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N}$ obtidos através de um gerador com uma distribuição de probabilidade qualquer, que tenha integrais primeiras $E, \mathbf{J}, \mathbf{P}$ e G , sendo $\mathbf{G}(t) = M\mathbf{q}_{cm}(t) - t\mathbf{P}$.

Começando por G , é importante lembrar que o PNCG tem equações de movimento autônomas, então no instante inicial tem-se $\mathbf{G} = M\mathbf{q}_{cm}$. Assim, para obter $\tilde{\mathbf{G}}$ desejado basta que

$$\mathbf{q}_{cm}(0) = \frac{1}{M}\tilde{\mathbf{G}},$$

e para obter tal centro de massas basta transladar as coordenadas \mathbf{q}_a individualmente:

$$\tilde{\mathbf{q}}_a = \mathbf{q}_a - \frac{1}{M}(\mathbf{q}_{cm}(0) - \tilde{\mathbf{G}}).$$

Como já dito anteriormente, o PNCG também é invariante por translações, uma vez que o potencial V o é. Isso significa que utilizar como condição inicial \mathbf{q} ou $\tilde{\mathbf{q}}$ não afeta a forma como o sistema evoluirá. Assim, uma facilidade bastante conveniente, como já feito anteriormente, é começar com o centro de massas na origem:

$$\tilde{\mathbf{q}}_a = \mathbf{q}_a - \frac{1}{M}\mathbf{q}_{cm}(0) \Rightarrow \tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{0}. \quad (5.1)$$

No caso de \mathbf{P} , para gerar um $\tilde{\mathbf{P}}$ é necessário obter $\tilde{\mathbf{p}}$ tal que $\tilde{\mathbf{P}} = \sum_{a=1}^N \tilde{\mathbf{p}}_a$. Então:

$$\tilde{\mathbf{P}} = \mathbf{P} - \mathbf{P} + \tilde{\mathbf{P}} = \sum_{a=1}^N \mathbf{p}_a - \frac{c_a}{C}(\mathbf{P} - \tilde{\mathbf{P}}), \quad C = \sum_{a=1}^N c_a, \quad c_a > 0, \forall a.$$

As constantes c_a podem ser quaisquer, correspondendo a pesos atribuídos a cada momento linear. No caso do PNCG, uma escolha conveniente de pesos é a massa de cada corpo, sendo então

$$\tilde{\mathbf{p}}_a = \mathbf{p}_a - \frac{m_a}{M}(\mathbf{P} - \tilde{\mathbf{P}}). \quad (5.2)$$

Para o momento angular total \mathbf{J} , embora para problemas planares baste aplicar

$$\tilde{\mathbf{p}}_a = \mathbf{p}_a - \frac{m_a}{I} \mathbf{q}_a \times (\mathbf{J} - \tilde{\mathbf{J}})$$

para obter $\tilde{\mathbf{J}}$, no caso geral em três dimensões a situação é mais complicada.

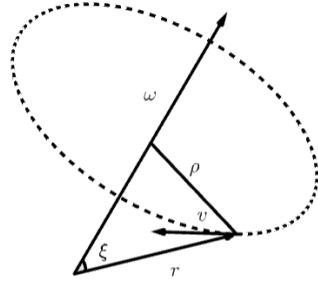


Figura 5.4: Situação descrita.

Considere uma partícula com posição \mathbf{r} e um vetor ω que define um eixo de rotação, do qual \mathbf{r} se distancia em ρ e forma um ângulo ξ e cuja velocidade da partícula a relação a é \mathbf{v} , como na figura 5.4. Nessa situação, temos que $\|\mathbf{v}\| = \rho \|\omega\|$ e $\sin \xi = \rho / \|\mathbf{r}\|$. Uma vez que $\mathbf{v} \perp \omega$ e $\mathbf{v} \perp \mathbf{r}$, podemos concluir que $\mathbf{v} \parallel \mathbf{r} \times \omega$. Mais ainda, temos que:

$$\|\mathbf{r} \times \omega\| = \|\mathbf{r}\| \|\omega\| \sin \xi = \rho \|\omega\| = \|\mathbf{v}\|,$$

então

$$\mathbf{v} = \mathbf{r} \times \omega. \quad (5.3)$$

O momento angular \mathbf{J} também é um vetor perpendicular a \mathbf{r} e a \mathbf{v} , mas \mathbf{J} e ω só são colineares quando $\mathbf{r} \perp \omega$. Porém, a partir de (5.3), tem-se que $\mathbf{J} = m\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \omega)$, então é possível construir um operador $\mathbf{I} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ a partir de m e \mathbf{r} que leva ω em \mathbf{J} como segue. Veja que

$$\mathbf{r} \times \omega = (r_2 \omega_3 - r_3 \omega_2) \hat{\mathbf{e}}_1 + (r_3 \omega_1 - r_1 \omega_3) \hat{\mathbf{e}}_2 + (r_1 \omega_2 - r_2 \omega_1) \hat{\mathbf{e}}_3,$$

então

$$\begin{aligned} \mathbf{J} = m\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \omega) &= m \begin{bmatrix} r_2 r_1 \omega_2 - r_2^2 \omega_1 - r_3^2 \omega_1 + r_1 r_3 \omega_3 \\ r_3 r_2 \omega_3 - r_3^2 \omega_2 - r_1^2 \omega_2 + r_1 r_2 \omega_1 \\ r_1 r_3 \omega_1 - r_1^2 \omega_3 - r_2^2 \omega_3 + r_2 r_3 \omega_2 \end{bmatrix} \\ &= m \begin{bmatrix} -(r_2^2 + r_3^2) & r_1 r_2 & r_1 r_3 \\ r_1 r_2 & -(r_1^2 + r_3^2) & r_2 r_3 \\ r_1 r_3 & r_2 r_3 & -(r_1^2 + r_2^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{bmatrix} := \mathbf{I}\omega. \end{aligned}$$

Tal aplicação \mathbf{I} já é bem conhecida na literatura pelo nome de *tensor de inércia*, fornecendo uma nova expressão para o momento angular. No caso de diversos corpos, a ideia é

definir um eixo de rotação comum e a partir dele aplicar transformações sobre a velocidade angular de cada corpo. A primeira parte é simples, pois

$$\mathbf{J} = \sum_{a=1}^N \mathbf{J}_a = \sum_{a=1}^N \mathbf{I}_a \boldsymbol{\omega} = \mathbf{I}_{total} \boldsymbol{\omega}.$$

A partir disso, para obter um momento angular desejado $\tilde{\mathbf{J}}$ basta encontrar um eixo $\boldsymbol{\omega}$ tal que

$$\mathbf{I}_{total} \boldsymbol{\omega} = \mathbf{J} - \tilde{\mathbf{J}}$$

e aplicar a transformação

$$\tilde{\mathbf{p}}_a = \mathbf{p}_a - m_a \mathbf{q}_a \times \boldsymbol{\omega}. \quad (5.4)$$

A essa altura, é natural suspeitar que aplicar (5.4) depois de (5.2) mudaria o valor de $\tilde{\mathbf{P}}$ e vice-versa. Porém, considere o misto das aplicações:

$$\tilde{\mathbf{p}}_a = \mathbf{p}_a - \frac{m_a}{M} (\mathbf{P} - \tilde{\mathbf{P}}) - m_a \mathbf{q}_a \times \boldsymbol{\omega}. \quad (5.5)$$

Temos:

$$\begin{aligned} \sum_{a=1}^N \tilde{\mathbf{p}}_a &= \tilde{\mathbf{P}} - \mathbf{q}_{cm} \times \boldsymbol{\omega} = \tilde{\mathbf{P}} \\ \sum_{a=1}^N \mathbf{q}_a \times \tilde{\mathbf{p}}_a &= \tilde{\mathbf{J}} - \frac{1}{M} \mathbf{q}_{cm} \times (\mathbf{P} - \tilde{\mathbf{P}}) = \tilde{\mathbf{J}}, \end{aligned}$$

pois $\mathbf{q}_{cm} = 0$. Assim, com o centro de massas na origem, é possível condicionar o momento linear total e o momento angular total separadamente.

Já para a energia total E , existem dois caminhos possíveis: aplicar transformações sobre as posições ou sobre os momentos lineares. Uma vez que E é separável, isto é,

$$E(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}),$$

e que as funções T e V têm sinais opostos no PNCG, existem muitas formas diferentes de balancear a energia total. Para obter uma energia total negativa, por exemplo, basta aproximar os corpos, mas pode ser suficiente reduzir as velocidades em vez disso. Já para uma energia total positiva, basta aumentar as velocidades, mas também pode ser possível apenas distanciar os corpos. No geral, tomando $\tilde{\mathbf{q}} = \alpha^{-1} \mathbf{q}$ e $\tilde{\mathbf{p}} = \beta \mathbf{p}$, tem-se:

$$\tilde{E} := E(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}}) = \beta^2 T(\mathbf{p}) + \alpha V(\mathbf{q}) = \beta^2 (E_0 - V_0) + \alpha V_0.$$

Neste trabalho, a solução aplicada para esse dilema foi aplicar a transformação necessária para as velocidades, e se a energia desejada for diferente de zero então é aplicada uma aproximação ou distanciamento entre os corpos. Na prática, isso foi dado pelo se-

guinte:

$$\beta = \sqrt{\frac{-V_0}{T(\mathbf{p}_0)}}, \quad \alpha = 1 + \frac{\tilde{E}}{V_0}$$

Um questionamento cabível é o quanto essa escolha afetou os resultados obtidos, uma vez que existem diversas outras transformações possíveis. Não chegamos a testar outros valores, então no momento não temos resposta para isso.

A transformação que condiciona a energia total afeta os momentos linear e angular totais:

$$\sum_{a=1}^N \tilde{\mathbf{p}}_a = \beta \mathbf{P}, \quad \sum_{a=1}^N \tilde{\mathbf{q}}_a \times \tilde{\mathbf{p}}_a = \frac{\beta}{\alpha} \mathbf{J}.$$

Este problema é de fácil resolução, pois basta que $\tilde{\mathbf{P}}$ e $\tilde{\mathbf{J}}$ sejam multiplicados pelas devidas constantes na equação (5.5), gerando a seguinte mudança de coordenadas:

$$\tilde{\mathbf{q}}_a = \frac{1}{\alpha} \left(\mathbf{q}_a - \frac{1}{M} \mathbf{q}_{cm}(0) \right), \quad (5.6)$$

$$\tilde{\mathbf{p}}_a = \beta \left(\mathbf{p}_a - \frac{m_a}{M} \left(\mathbf{P} - \frac{\tilde{P}}{\beta} \right) - m_a \mathbf{q}_a \times \boldsymbol{\omega} \right), \quad (5.7)$$

$$\mathbf{I}_{total} \boldsymbol{\omega} = \mathbf{J} - \frac{\tilde{\mathbf{J}} \alpha}{\beta}, \quad (5.8)$$

$$\alpha = 1 + \frac{\tilde{E}}{V_0}, \quad \beta = \sqrt{\frac{-V_0}{T(\tilde{\mathbf{p}}_a/\beta)}} \quad (5.9)$$

Observe que β fica definido implicitamente pela equação (5.9). Elevando os dois lados ao quadrado é possível isolar β , obtendo-se a seguinte expressão:

$$\beta = \pm \sqrt{-\frac{V_0 + S_2}{S_1}}, \quad (5.10)$$

onde

$$S_1 = \sum_{a=1}^N \frac{1}{2m_a} \|\mathbf{K}_1^a\|^2 = \sum_{a=1}^N \frac{1}{2m_a} \left\| \mathbf{p}_a - \frac{m_a}{M} \mathbf{P} - m_a \mathbf{q}_a \times (\mathbf{I}_{total}^{-1} \mathbf{J}) \right\|^2,$$

$$S_2 = \sum_{a=1}^N \frac{1}{2m_a} \|\mathbf{K}_2^a\|^2 = \sum_{a=1}^N \frac{1}{2m_a} \left\| \frac{m_a}{M} \tilde{\mathbf{P}} + \alpha m_a \mathbf{q}_a \times (\mathbf{I}_{total}^{-1} \tilde{\mathbf{J}}) \right\|^2,$$

$$\sum_{a=1}^N \frac{1}{m_a} \langle \mathbf{K}_1^a, \mathbf{K}_2^a \rangle = 0.$$

A escolha do sinal de β define a evolução do sistema, uma vez que a velocidade de cada partícula é multiplicada por β . O sistema com $\beta < 0$ é o equivalente de simular o caso $\beta > 0$ utilizando um tamanho de passo $h^- < 0$ para integradores reversíveis, ou seja, escolhido um sinal de β , o seu oposto equivale a integrar o sistema no sentido temporal oposto. Em termos de posições, porém, conseguimos uma única configuração que atende

às expectativas de integrais primeiras e tem centro de massas centrado na origem. Veja um exemplo do mencionado na figura 5.5.

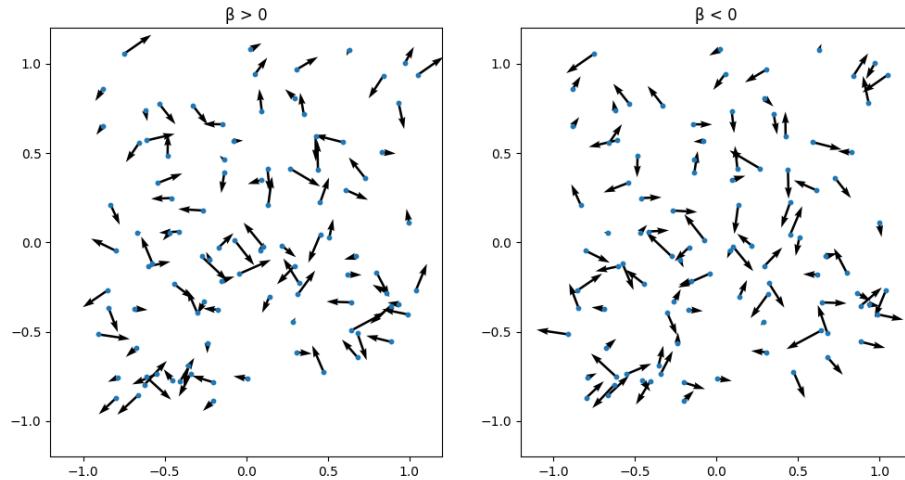


Figura 5.5: Posições e momentos lineares em um problema de 100 corpos com todas as integrais primeiras nulas para os dois valores de β .

5.2.2 Condições de estabilidade

Em busca de um sistema de unidades padrão que permitisse a comparação de resultados obtidos por diferentes pesquisadores do PNCG, (HÉNON, 1972; HEGGIE e MATHIEU, 1986) propõem utilizar o seguinte:

$$G = 1, \quad M = 1, \quad R_V = 1.$$

sendo R_V o raio de virial. Isso significa que temos o seguinte, conforme equação (3.19):

$$V \approx -\frac{GM^2}{2R_V} = -\frac{1}{2},$$

e pelo Teorema do Virial (Teorema 3.5.3) para uma relação de equilíbrio instantânea:

$$T = -\frac{1}{2}V \approx \frac{1}{4} \Rightarrow E = -\frac{1}{4}.$$

Para sistemas com essas condições iniciais, é esperado que, com alguma regularização em uso (como o amortecimento do potencial, por exemplo), o sistema fique limitado - ou seja, *estável* - , ao menos temporariamente.

Os testes apresentados nas próximas subseções nos quais as massas são iguais e somam 1 utilizam as condições de Hénon.

5.3 Colisões

Como inicialmente discutido na seção 3.4, existem algumas formas de lidar com colisões no PNCG e que se aplicam para aproximações muito intensas, ou *quase colisões*, uma vez que o conjunto de valores iniciais que levam a uma colisão em tempo finito têm medida zero. A abordagem com colisões elásticas é uma delas.

Para utilizar colisões, como já dito, um meio natural é definir uma densidade ρ para a massa de modo que

$$r_a = \sqrt[3]{\frac{3m_a}{4\pi\rho}} \quad (5.11)$$

é o raio de um corpo esférico de massa m_a . Cada escolha de densidade possível gera um conjunto de trajetórias diferentes, uma vez que uma aproximação intensa que é considerada como colisão para um certo ρ_1 pode não o ser para um ρ_2 diferente. Porém, este método possui a vantagem de garantir a reproduzibilidade das simulações.

Um problema de utilizar colisões elásticas é que nem sempre o raio é o suficiente para detectar uma colisão ou quase-colisão antes que o estrago numérico seja feito. Pode acontecer, por exemplo, de em um instante t dois corpos estarem distantes o suficiente para não haver colisão mas no instante $t + \delta t$ os dois volumes associados aos corpos terem uma interseção não vazia no espaço de configurações - na prática, um corpo *entrar* no outro, como na figura 5.6. Uma tática que pode ser utilizada para evitar isso é: uma vez detectada a interseção, interpolar as trajetórias entre os instantes t e $t + \delta t$, obtendo assim o exato momento da colisão $t \leq t^* \leq t + \delta t$, aplicar a colisão em t^* e substituir a trajetória com interseção em $t + \delta t$ pela trajetória em que houve colisão no instante t^* . Embora não exista dificuldade teórica em tal tática, aplicá-la numericamente é um desafio, especialmente em problemas de muitos corpos, pois todo esse processo é, além de custoso, computacionalmente complicado de ser avaliado, por isso não foi utilizado.

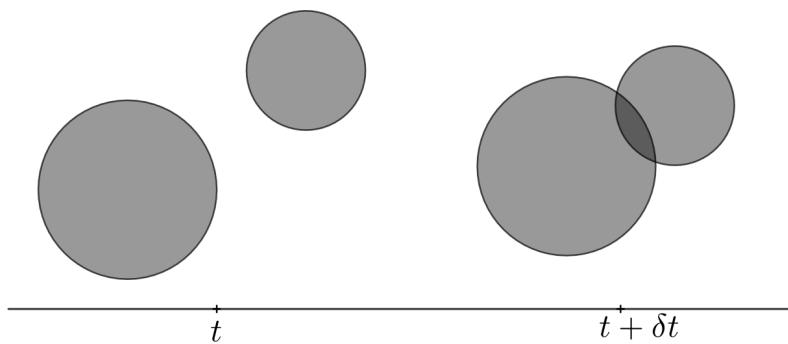


Figura 5.6: Problema descrito, onde o instante de colisão exato t^* é tal que $t \leq t^* \leq t + \delta t$

Outra saída mais simples para o problema é: uma vez detectada uma aproximação no instante $t + \delta t$ intensa o suficiente para desestabilizar numericamente o sistema antes de uma colisão elástica surtir efeito, voltar para o instante t e aplicar a colisão elástica neste instante. Existem dois problemas com essa tática: é preciso escolher mais um valor ϵ_E (ligado à energia) para poder definir o que é uma *desestabilização* considerável e é possível que retornar ao passo anterior resolva o problema de imediato, mas jogue a partícula colidida em rota de colisão com outra partícula, gerando uma situação recursiva.

O primeiro problema poderia ser resolvido com estatística, identificando uma “desestabilização” como um *outlier* numa estatística suficiente para a energia, por exemplo, ou com o rigor dos integradores numéricos, pois cada integrador tem um teto para o erro das trajetórias e consequentemente um teto para o erro da energia total, sendo uma “desestabilização” qualquer coisa acima dessa margem. A solução estatística chegou a ser brevemente testada mas não ofereceu resultados satisfatórios, uma vez que trouxe mais um custo computacional e não foi capaz de se livrar do segundo problema. A solução com teto dos integradores não foi implementada por dificuldades teóricas em determinar o teto, mas pretendemos avaliar essa medida de erro de cada método no futuro.

Uma última questão com as colisões elásticas é o custo de identificar seu acontecimento. Da mesma forma que o potencial e as forças, são necessárias $N(N - 1)/2$ verificações para identificar uma colisão, sendo então mais uma operação computacionalmente custosa. Existem outras formas mais eficientes de detectar colisões e há toda uma literatura voltada para isso, como [ERICSON, 2005](#), pois existe uma gama de aplicações que necessitam de métodos eficientes para detecção de colisões. Para este trabalho, por facilidade, foi utilizada a verificação um-a-um comentada.

Existem outras regularizações que permitem lidar com colisões, especialmente colisões binárias, como a transformação de Levi-Civita (para problemas planares), sua generalização no método de Kustaanheimo-Stiefel e a alternativa pelo método de Burdet-Heggie ([AARSETH, 2003](#)). Nenhuma dessas regularizações foi estudada a fundo então estas não serão tratadas neste trabalho. Para mais detalhes, a referência de Aarseth é recomendada para os três métodos mencionados, tendo o seu capítulo 4 totalmente voltado para este problema.

Há também outra forma de evitar colisões e quase-colisões, que é impondo um limite sobre o potencial. Tomando $\epsilon > 0$, definimos o potencial amortecido

$$V_\epsilon = -G \sum_{a < b} \frac{m_a m_b}{\sqrt{r_{ab}^2 + \epsilon^2}}, \quad (5.12)$$

o que gera as forças

$$\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_a} = G \sum_{b \neq a} m_a m_b \frac{\mathbf{q}_b - \mathbf{q}_a}{(r_{ab}^2 + \epsilon^2)^{3/2}}. \quad (5.13)$$

Observe que apesar da diferença nos cálculos, a energia total amortecida $E_\epsilon = T + V_\epsilon$ ainda é conservada, pois

$$\frac{dE_\epsilon}{dt} = \nabla_p T \cdot \dot{\mathbf{p}} + \nabla_q V_\epsilon \cdot \dot{\mathbf{q}} = 0.$$

O uso de um amortecimento pode levantar dúvidas naturais a respeito da precisão dos resultados obtidos com simulações. É fato que o mesmo conjunto de valores iniciais leva a um resultado quando usado o potencial V e a outro resultado quando usado o potencial V_ϵ . Porém, quando o interesse está nas propriedades dinâmicas do sistema e não em trajetórias individuais - o que no geral ocorre para valores de N suficientemente grandes -, ϵ precisa ser relativamente grande para que o resultado final seja notavelmente diferente ([AARSETH, 2003](#), pg. 235).

Dessa forma, tanto a colisão elástica quanto o potencial amortecido conservam a energia de alguma forma, então foram implementados no programa final. Cabe observar que uma possível solução para se livrar de alguns dos problemas comentados no uso de colisões elásticas é utilizar um método híbrido que incorpore o amortecimento, além de utilizar o corretor para amenizar a instabilidade do potencial. Ainda assim, é esperado que as órbitas individuais sejam diferentes, mesmo que as integrais primeiras sejam as mesmas. Um exemplo pode ser visto na figura 5.7.

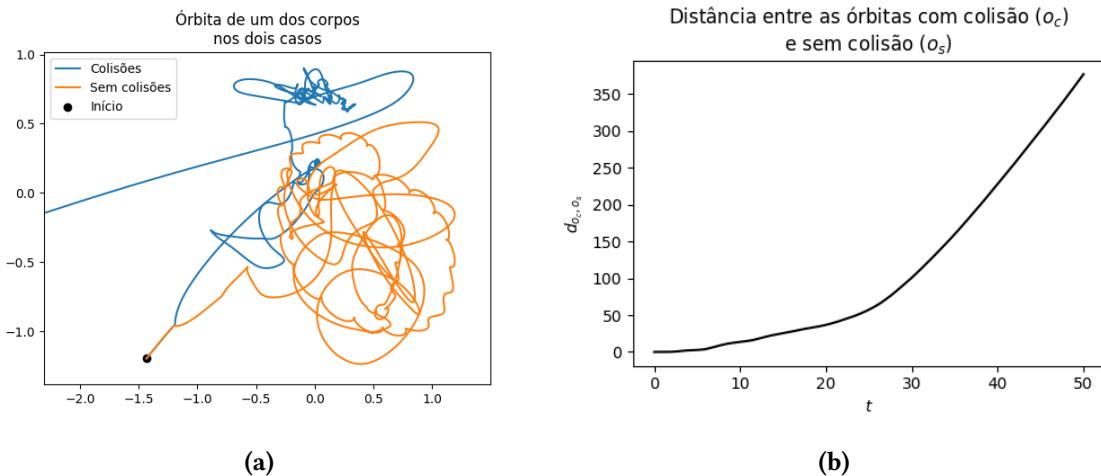


Figura 5.7: Simulações do problema-modelo A.2 via método RKN671 com $h = 10^{-3}$, $\epsilon = 5h$ e corretor com margem de erro da energia 10^{-10} no intervalo $[0, 50]$. Em um dos casos utilizou-se colisões ativadas com $r_a = 5h$, $a = 1, 2, \dots, N$ e no outro as colisões estavam desativadas.

5.4 Uso do corretor numérico

O corretor numérico apresentado na seção 4.4 possui algumas questões sobre sua usabilidade no programa que valem ser discutidas nesta seção. Para começar, é interessante que o uso de um corretor numérico não eleve drasticamente o tempo necessário para realizar uma simulação. No caso deste corretor, existem alguns custos associados.

O primeiro é no cálculo das integrais primeiras. Embora $\Psi(z_0)$ seja calculado apenas uma vez, a cada iteração que utiliza o corretor é necessário calcular $\Psi(z)$. O cálculo direto da energia total para um potencial de N-corpos, por exemplo, tem ordem $O(N^2)$ de operações, podendo ser então um custo relevante.

Um segundo custo é na resolução do sistema linear (4.28), pois a matriz jacobiana $D\Psi$ tem tamanho $k \times 6N$. Observe, porém, que a matriz

$$\Gamma(z) = D\Psi(z)D\Psi(z)^T \quad (5.14)$$

é uma matriz normal, e seu tamanho é $k \times k$. Além disso, cada elemento seu é dado diretamente por um produto interno:

$$\Gamma_{ij} = \langle \nabla \psi_i, \nabla \psi_j \rangle,$$

o que a caracteriza como uma matriz de Gram, e também em casos com poucas integrais primeiras de interesse isso significa que esta pode ser calculada manualmente, otimizando uma parte do processo.

Além disso, a resolução do sistema de equações

$$\Gamma(\mathbf{y})\boldsymbol{\alpha} = \Psi(\mathbf{z}) - \Psi(\mathbf{z}_0).$$

também possui um custo associado, o que depende da quantidade de integrais primeiras utilizadas e do método utilizado para resolução. A primeira abordagem computacional tomada foi utilizar a sub-rotina `dgesv`, do LAPACK, a qual resolve um sistema $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, com \mathbf{A} $n \times n$ aplicando a decomposição LU sobre \mathbf{A} , o que tem custo $O(n^3)$, e resolvendo o sistema triangular restante, com custo $O(n^2)$.

Porém, uma vez que a matriz Γ é de Gram, é também no mínimo positiva semi-definida. Isso significa que em vez de utilizar LU, que tem como fundo o pivoteamento gaussiano, faz sentido utilizar a decomposição de Cholesky, que apesar de ter $O(n^3)$ consome apenas metade das operações do pivoteamento gaussiano, e trata-se de um algoritmo que sempre é numericamente estável (TREFETHEN e BAU, 1997, pgs. 172–177). No LAPACK, as subrotinas utilizadas para isso foram `dpotrf` (para a fatoração de Cholesky) e `dptrs` (para a resolução de um sistema linear Cholesky-fatorado).

Realizamos alguns testes com os dois métodos de resolução mas não encontramos diferenças expressivas. Um exemplo de aplicação foi em um problema de 10^3 corpos com condições de Hénon (ver seção 5.2), e o resultado pode ser encontrado na figura 5.8 e na tabela 5.4. Vale ressaltar que, quanto ao desempenho, ambas as simulações levaram por volta de 10,4 minutos, com uma pequena vantagem de alguns segundos para o uso de Cholesky.

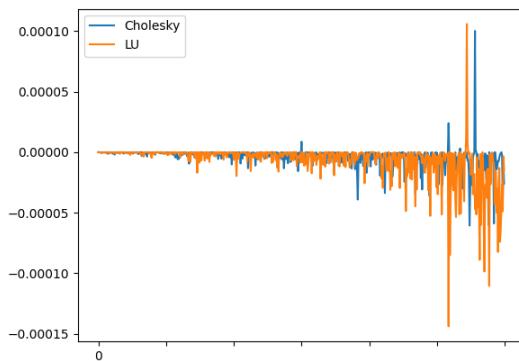


Figura 5.8: Variação da energia ΔE em um problema de 10^3 corpos utilizando o integrador Velocity-Verlet (2^a ordem), $h = 0.1$ e $\epsilon = 0.04$, com margem de erro da energia 10^{-11} .

Diante do custo, vale questionar também se de fato faz sentido utilizar todas as integrais primeiras no corretor. Por mais que mais informações devam levar a uma correção melhor, uma integral primeira que seja numericamente estável pode ser só um custo a mais e não trazer resultados tão diferentes do que sem o seu uso.

	Cholesky	LU
Média	$-3.639 \cdot 10^{-6}$	$-6.656 \cdot 10^{-6}$
Mediana	$-1.208 \cdot 10^{-6}$	$-1.277 \cdot 10^{-6}$
Desvio padrão	$8.599 \cdot 10^{-6}$	$1.551 \cdot 10^{-5}$

Tabela 5.4: Estatísticas sobre o valor ΔE , nas condições da figura 5.8.

No PNCG, o centro de massas e o momento linear total são numericamente bem-comportados por serem lineares, e o momento angular também é estável por ser uma expressão livre de singularidades, como exemplificado na figura 4.9 da seção 4.3. A energia total, por outro lado, é bastante instável em aproximações intensas devido ao potencial ser inversamente proporcional às distâncias. Dessa forma, como sugere [Nacozy, 1972](#), aplicar a correção somente na energia total no PNCG é, no geral, suficiente. O vetor de correção α (que é um escalar nesse caso) possui uma forma explícita:

$$\alpha = \frac{E(z) - E(z_0)}{\|\nabla E(z)\|^2}. \quad (5.15)$$

Um exemplo de aplicação no problema-modelo A.2 com as duas formas de correção pode ser visualizado na figura 5.9.

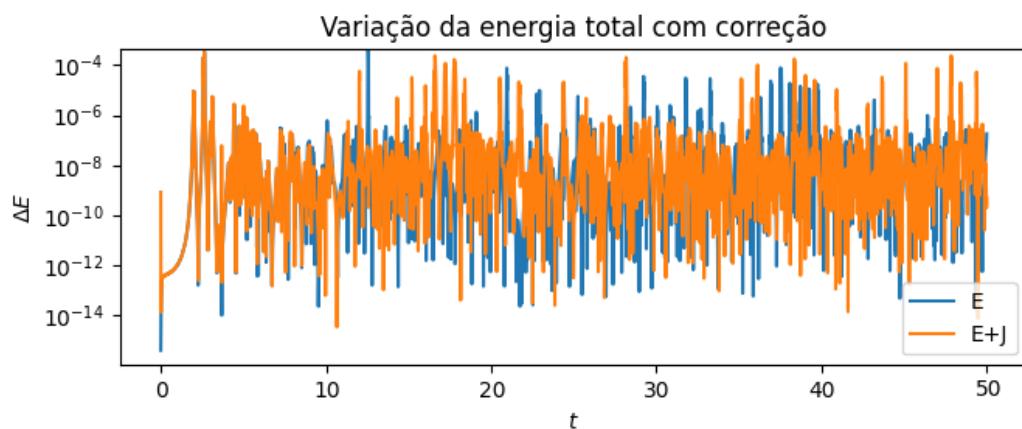


Figura 5.9: Variação da energia no problema-modelo A.2 simulado via método RKN671 com $h = 10^{-3}$, $\epsilon = 10^{-1}$ e com margem de erro da energia 10^{-10} no intervalo $[0, 50]$. Em azul, foi aplicada a correção somente na energia total, enquanto em laranja foi aplicada a correção também no momento angular total.

De toda forma, o custo do corretor só ocorre quando este é aplicado, então um bom critério de aplicabilidade pode reduzir o custo do corretor através da sua utilização somente quando estritamente necessário. No problema-modelo utilizado por Nacozy, o corretor era aplicado quando o erro da energia total atingia um valor por volta de 100 vezes menor que o erro de truncamento desejado. Constatamos empiricamente que com o uso do amortecimento no potencial, uma vez que o potencial deixa de ter singularidades, o teto pode ser tanto quanto desejado, então a escolha de Nacozy é razoável para o PNCG.

A implementação do corretor numérico é a sub-rotina correcao, que depende de outras sub-rotinas de mecânica do programa.

5.5 Aplicação: Dinâmica de Formas

Na seção 3.6 apresentamos uma breve introdução à Dinâmica de Formas sobre o PNCG, onde introduzimos a *complexidade* C_S como uma medida de evolução de um sistema e também as *coordenadas objetivas* (σ, π) sobre o espaço de formas. Nesta seção, visualizaremos alguns dos resultados apresentados.

Todas as simulações utilizadas aqui foram feitas com momento angular total $\mathbf{J} = 0$, momento linear total $\mathbf{P} = 0$ e centro de massas $\mathbf{q}_{cm} = 0$. A energia foi testada com diferentes valores para diferentes objetivos, e os valores são explicitados em cada caso.

5.5.1 Problemas de 3 corpos

Para visualizar as coordenadas objetivas (σ, π) , tomamos primeiramente um problema de 3 corpos com uma trajetória simples: um par kepleriano e um corpo ejetado, como na figura 5.10a. Trata-se do problema-modelo A.3, integrado no intervalo $[0, 50]$ via método de Verlet com $h = 10^{-3}$, sem correção.

Este é um sistema com energia total 0, então os resultados da Dinâmica de Formas se aplicam. Por exemplo, a ejeção de um dos corpos corresponde a um atrito no espaço de fases (tomando a coordenada ω). Além disso, a complexidade (figura 5.10b) aumenta no sentido futuro devido à separação do sistema em dois, embora possua fortes oscilações ligadas às aproximações do sistema binário.

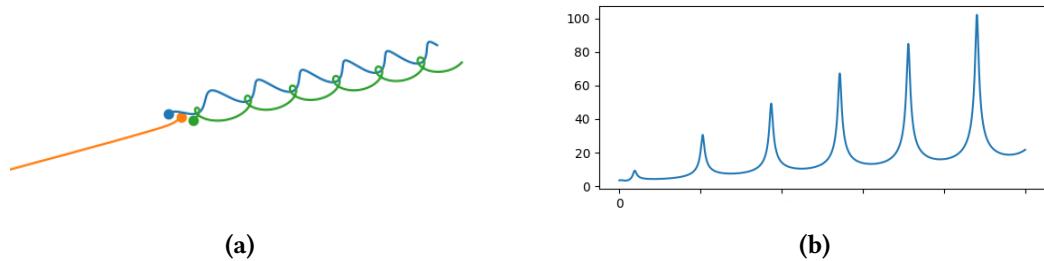


Figura 5.10: Problema-modelo A.3. À esquerda, recorte das trajetórias. À direita, a complexidade apresentada pelo sistema.

Na figura 5.11a é possível observar os comportamentos de ejeção e de formação de binários. Embora o corpo ejetado se afaste a princípio, conforme o par binário se forma, o ejetado desacelera e inicia uma trajetória cílica e dissipativa. E, de fato, conforme a figura 5.11b mostra, o corpo ejetado está desacelerando, enquanto o momento de forma (π) dos outros dois apresenta trajetórias circulares com um raio cada vez maior e cada vez mais rapidamente.

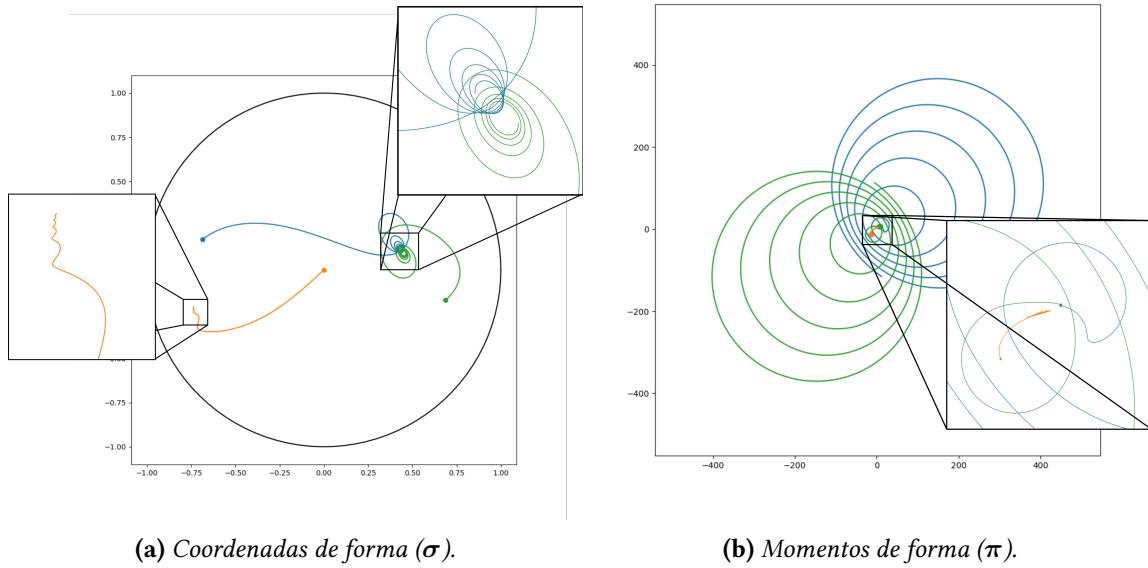


Figura 5.11: Coordenadas objetivas (σ, π) do problema-modelo A.3.

Testamos também o comportamento de um sistema de 3 corpos com energia $E > 0$, o problema-modelo A.4, integrado no intervalo $[4.18, 5000]$ via método SVCP8S15 com $h = 10^{-4}$ sem correção. O motivo para o instante inicial específico é que o sistema começa com momento de dilatação negativo, e por facilidade foi fixado $h > 0$, portanto no intervalo $[0, 4.18]$ tem-se $D < 0$, o que significa que o ponto de Janus para este caso está na vizinhança de $t = 4.18$.

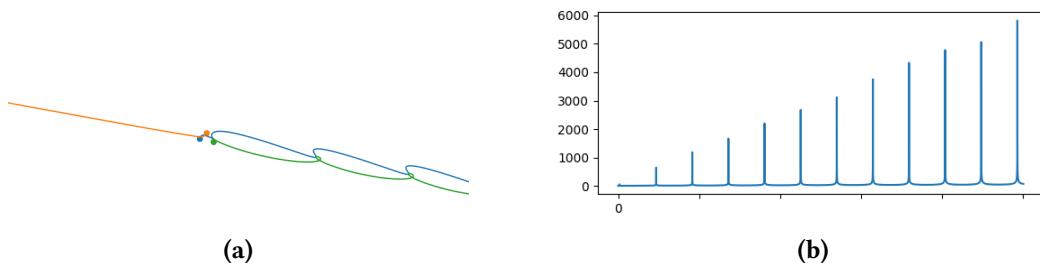


Figura 5.12: Problema-modelo A.4. À esquerda, recorte das trajetórias. À direita, a complexidade apresentada pelo sistema.

Observe que neste problema os picos da complexidade são maiores (figura 5.12b), refletindo a intensidade das aproximações do sistema binário formado.

Isso se apresenta também nas coordenadas no espaço de formas. Como no problema com $E = 0$, o corpo ejetado desacelera e começa a apresentar um comportamento cíclico e dissipativo (figura 5.13a). Porém, nesse caso a dissipação é bastante maior que no caso anterior. É visualmente notável a diferença na dissipação observando os momentos (figura 5.13b), pois o corpo dissipado tem momento oscilando próximo de zero e o sistema binário

formado apresenta trajetórias circulares com raios cada vez maiores e com ordem de grandeza 10^5 , enquanto no caso $E = 0$ tinha-se ordem de grandeza 10^2 .

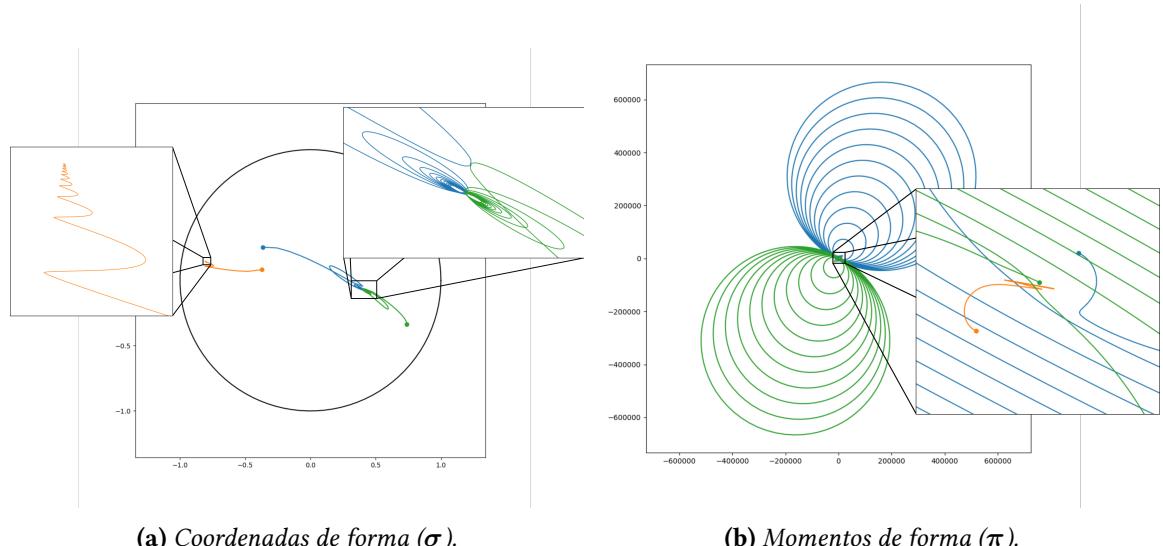


Figura 5.13: Coordenadas objetivas (σ, π) do problema-modelo A.4.

5.5.2 Problemas de 20 e 100 corpos

Para problemas com $N \geq 10$, se mostrou pouco produtivo analisar as trajetórias no espaço de formas devido à quantidade de trajetórias. Além disso, dada a obrigatoriedade separação do sistema em subsistemas em afastamento mútuo, a evolução no tempo newtoniano aumenta o momento de inércia R^2 mais rapidamente que o afastamento entre os corpos, levando as trajetórias no centro da esfera unitária a esferas cada vez menores e os corpos distantes a desacelerarem em algum ponto da esfera.

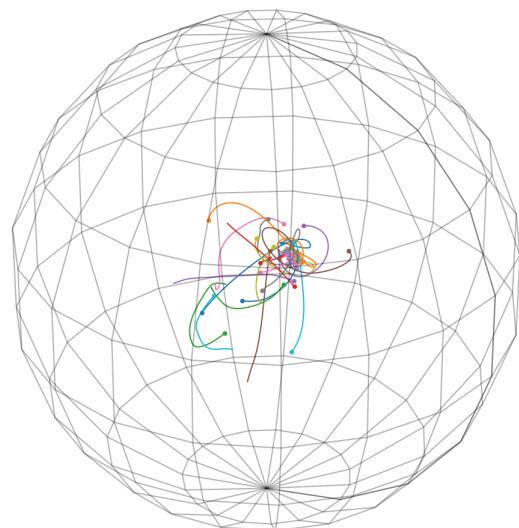


Figura 5.14: Trajetória objetiva do problema-modelo A.5.

Para visualizar esse comportamento, simulamos o problema-modelo A.5 com 20 corpos no intervalo $[0, 5000]$ via RKN671 com $h = 10^{-2}$ e $\epsilon = 8h$. Nesse problema, todas as integrais primeiras são nulas. A trajetória objetiva pode ser visualizada na figura 5.14.

A complexidade (figura 5.15), porém, para $N = 20$ já apresenta mais nitidamente o comportamento esperado: a expansão do sistema (grande escala) faz com que C_S cresça no tempo newtoniano, e as interações entre os subsistemas (pequena escala) se apresentam nas variações desse crescimento, bastante nítidas nos casos de aproximações intensas facilmente identificáveis pelos maiores picos de C_S .

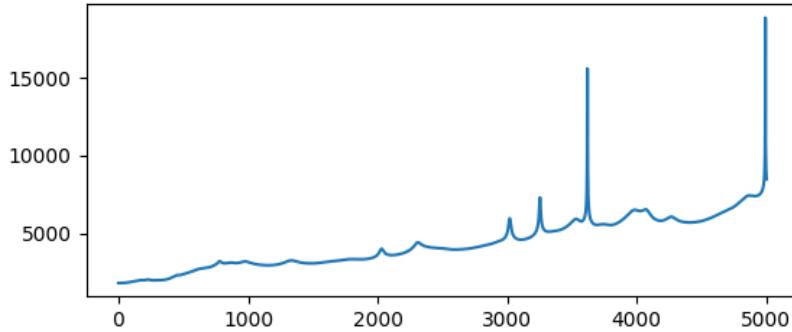


Figura 5.15: Complexidade do problema-modelo A.5.

Simulamos também um problema de 100 corpos com todas as integrais primeiras nulas (A.6) no intervalo $[-10^6, 10^6]$ via método de Verlet com $h = 0.04 = \epsilon$ em paralelo. Vale ressaltar que a simulação levou cerca de 108 segundos.

Na figura 5.16 podemos observar como as propriedades da complexidade se mostram ainda mais nítidas que no caso $N = 20$. Além disso, como foi feita também a integração para o passado, é possível visualizar o ponto de Janus (o mínimo de C_S). Nesse caso, dada a grande variação de C_S , é possível observar que o sistema não apresentou grande expansão num primeiro momento, mas uma quantidade grande de interações no centro de massas.

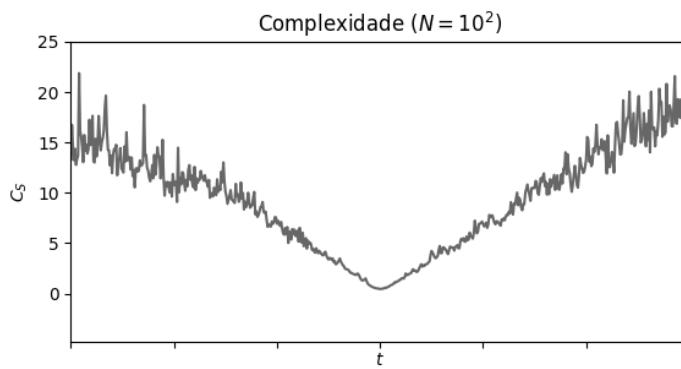


Figura 5.16: Complexidade do problema-modelo A.6.

5.5.3 Problemas de 1000 corpos

Passando para escalas maiores, realizamos três simulações com $N = 10^3$ no intervalo $[-10^4, 10^4]$ via método de Verlet com $h = 0.04 = \epsilon = h$ para observar o comportamento de C_S com diferentes valores de E : -0.25 , 0 e 0.25 .

Energia total nula

Começando pelos casos nos quais temos informações esperadas sobre o comportamento, o problema-modelo A.8 contém as condições iniciais para $E = 0$ (todas as integrais primeiras são nulas, na verdade). Na figura 5.17 é possível observar o crescimento variado de C_S de maneira semelhante em relação ao eixo definido pelo Ponto de Janus. A vizinhança desse instante se apresentou nesse caso como um momento de rápida expansão e intensas aproximações, seguido pelo início de um momento de maior estabilidade tanto dos corpos ejetados quanto dos corpos ainda próximos ao centro.

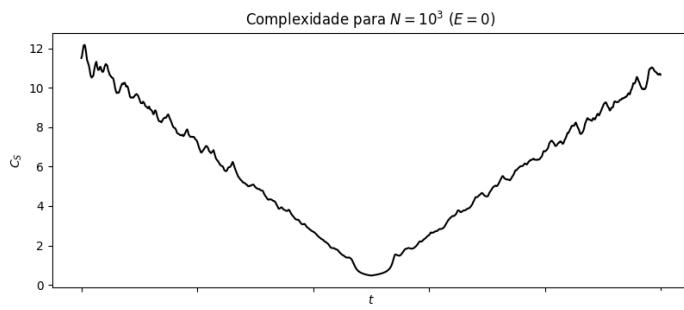


Figura 5.17: Complexidade do problema-modelo A.8.

A evolução do sistema pode ser observada na figura 5.18. O centro de massas concentra grande parte dos corpos mesmo nos limites do intervalo considerado, mas a ejeção de partículas continua acontecendo.

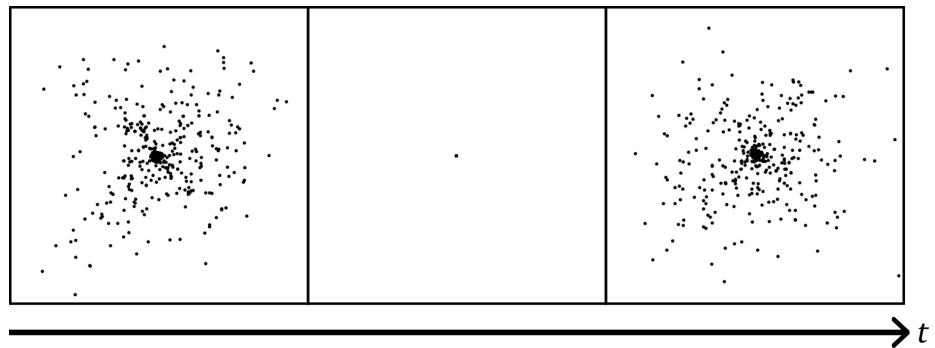


Figura 5.18: Instantes do bordo e $t = 0$ do problema-modelo A.8.

Energia total positiva

Já para o caso $E = 0.25$ no problema-modelo A.9, com massas $m = 1/N$, observamos uma baixa variação de C_S (figura 5.19). Como o sistema necessariamente se contrai e

se expande (devido ao comportamento do momento de inércia previsto pela relação de Lagrange-Jacobi), isso indica que a interação gravitacional entre os corpos é quase inversamente proporcional ao tamanho do sistema, o que sugere a não formação de binários e, do ponto de vista da do espaço de formas, o resultado é o esperado: o sistema assintoticamente congela.

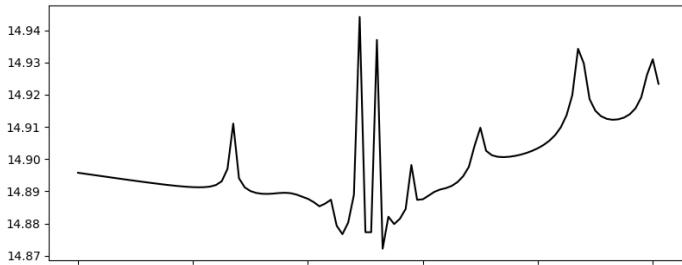


Figura 5.19: Complexidade do problema-modelo A.9.

Na figura 5.20 é possível observar um espalhamento bastante uniforme dos corpos no espaço. Uma vez que os valores iniciais foram gerados através de uma distribuição uniforme, isso reflete o baixo nível de interação entre os corpos.

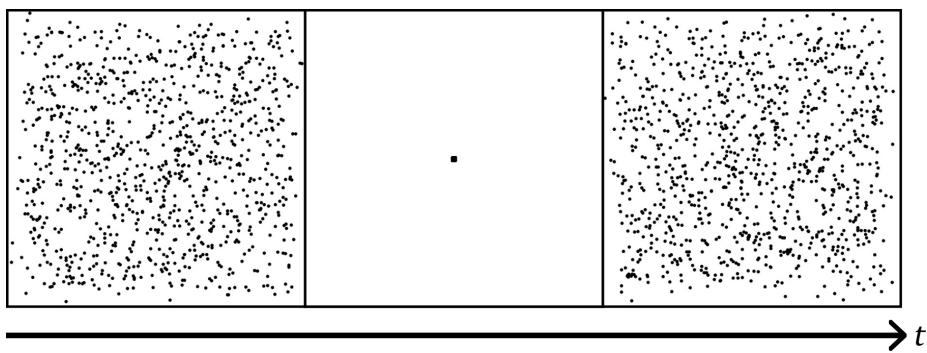


Figura 5.20: Instantes do bordo e $t = 0$ do problema-modelo A.9.

Optamos então por gerar novos valores iniciais mas com massas um pouco maiores individualmente, mas o suficiente para o sistema aumentar 10^3 vezes em massa total (problema-modelo A.10). Nesse caso, o problema apresentou um comportamento mais parecido com o caso $E = 0$, pois as interações gravitacionais foram mais intensas (veja figura 5.21).

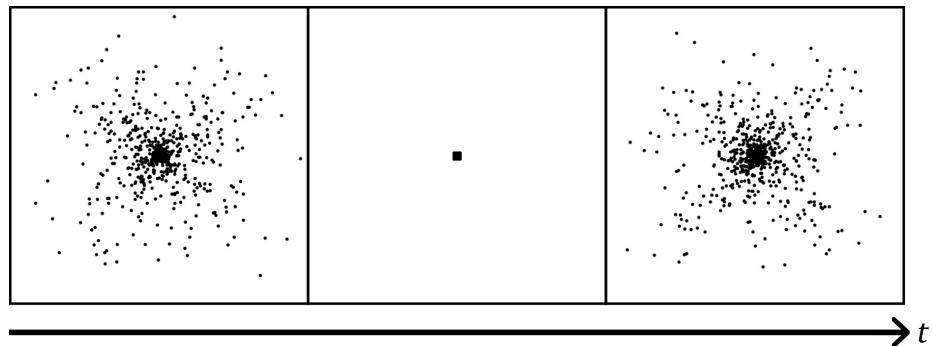


Figura 5.21: Instantes do bordo e $t = 0$ do problema-modelo A.10.

A complexidade também apresentou um comportamento diferente do primeiro exemplo de $E = 0.25$ com um formato semelhante ao de $E = 0$, mas com uma grande diferença de escala (veja figura 5.22).

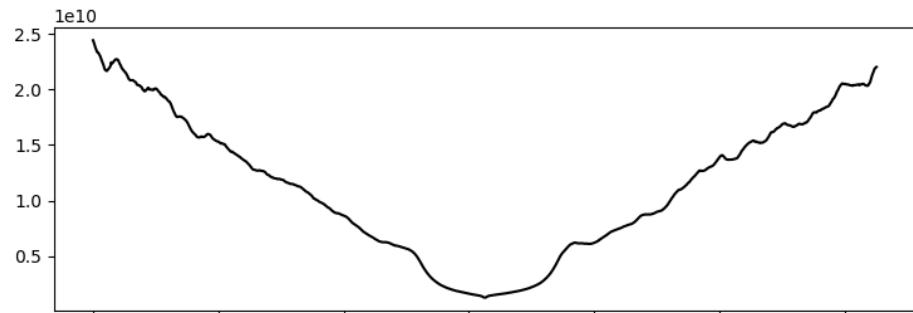


Figura 5.22: Complexidade no problema-modelo A.10.

Energia total negativa

Por fim, no caso $E = -0.25$ tivemos um resultado curioso. Embora as condições impostas inicialmente tenham sido as de Hénon (veja subseção 5.2.2), a complexidade apresentou um comportamento de cuspide (figura 5.23). O que ocorre é que na evolução do sistema nesse caso são ejetados alguns corpos (o que provoca o crescimento) mas mantém relativa estabilidade no centro de massas.

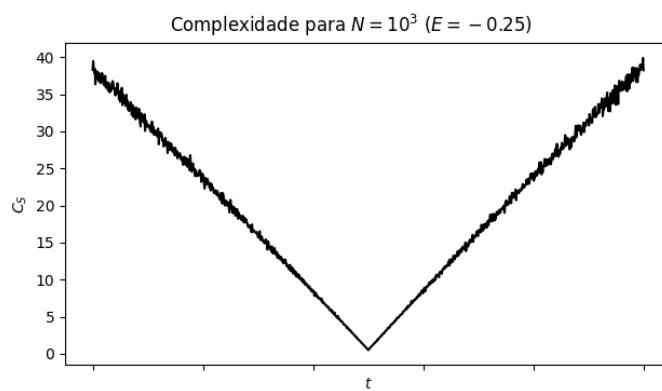


Figura 5.23: Complexidade no problema-modelo A.7.

Esse comportamento pode ser observado na figura 5.24, onde a maior parte do sistema fica contida na região central enquanto alguns poucos corpos são ejetados, sem formação de binários.

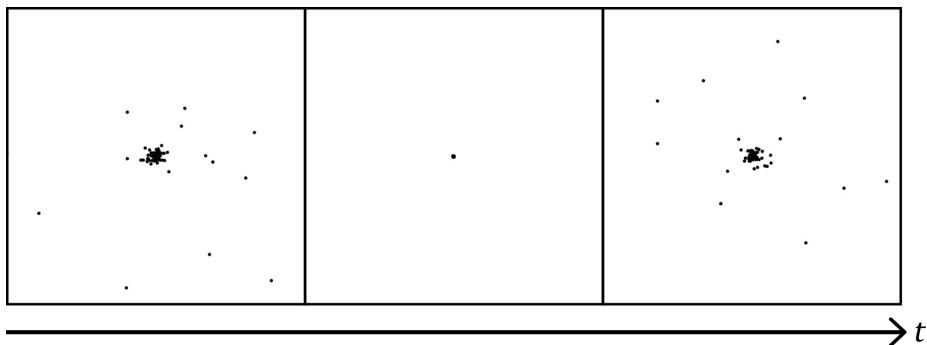


Figura 5.24: Instantes do bordo e $t = 0$ do problema-modo A.7.

Na vizinhança do Ponto de Janus, porém, é possível encontrar semelhanças com os casos $E \geq 0$, como na formação de um pequeno “vale” a princípio seguido do início da variação (figura 5.25).

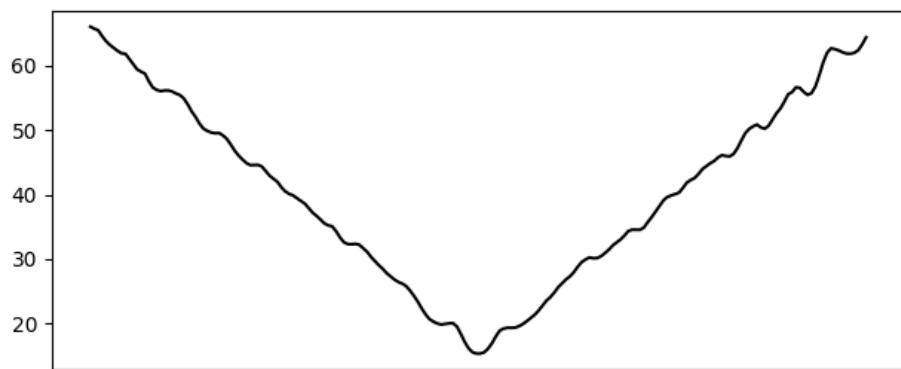


Figura 5.25: Vizinhança do ponto de Janus no problema $N = 10^3$ com $E = -0.25$.

Capítulo 6

Conclusão

Apresentamos neste trabalho algumas formas de simular numericamente o Problema de N-Corpos Gravitacional. Ainda que mal tenhamos saído da superfície na área de simulações numéricas, obtivemos alguns resultados.

Para começar, o PNCG é um problema mecânico ideal para um primeiro mas dedicado estudo de métodos numéricos. Sua instabilidade numérica e todas as dificuldades técnicas apresentadas, como o custo computacional e as colisões, necessitam de atenção e estimulam a criatividade matemática continuamente.

Qualitativamente, o capítulo 4 mostra nitidamente a superioridade das aproximações numéricas dos integradores simpléticos, especialmente para integrações em larga escala, demonstrando a solidez da Mecânica Hamiltoniana esperada no capítulo 2. Vale ressaltar que muita teoria já existe a respeito dos métodos simpléticos, inclusive sobre sua estabilidade através da teoria de Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM), e trata-se de uma área em ativo desenvolvimento a qual merece atenção.

Além disso, existem muitas outras formas de integração numérica que não foram tratadas, como os métodos implícitos, os com controle automático de tamanho de passo e os métodos de passo múltiplo. Para o PNCG em específico, existem esquemas de passo múltiplo utilizados na literatura que demonstram um bom desempenho para simulações astrofísicas e cosmológicas, como apresenta [AARSETH, 2003](#).

Também vimos que o corretor numérico se mostrou aplicável e que corrigir somente a energia é suficiente, embora não tenha sido possível testá-lo em larga escala. Pretendemos simular problemas com valores de N maiores e em escalas de tempo mais longas que as aqui apresentadas para entender melhor a confiabilidade da correção.

Quanto às colisões elásticas, também não foi possível neste tempo fazer testes em larga escala para intuir sobre sua aplicabilidade, mas é uma alternativa com potencial. Quanto ao amortecimento, o uso de diferentes valores de ϵ em diferentes simulações neste trabalho que ainda assim validavam os resultados teóricos esperados indicam a pouca influência de um ϵ suficientemente pequeno sobre os resultados qualitativos do sistema como um todo, apesar da diferença nas trajetórias individuais.

O método apresentado para gerar valores iniciais se mostrou enviesado. Isso se reflete

na dramática diferença entre utilizar massas $m = 1/N$ e massas $m > 1$ nas simulações com $E > 0$ vistas na seção 5.5. De fato, cabe um maior estudo sobre a geração de valores iniciais para o PNCG e a devida escolha de parâmetros de modo que seja possível extrair resultados mais gerais das simulações.

Quanto ao programa desenvolvido, disponível em <https://github.com/potalej/gravidade-fortran> (POTALEJ, 2024), este se mostrou bem-sucedido nas simulações embora com um custo computacional relativamente expressivo. As simulações de $N = 10^3$ para grandes intervalos de futuro e passado levaram cerca de 20 minutos quando se habilitava a paralelização no *hardware* disponível, gerando arquivos consideravelmente grandes e de custosa análise via Python. O uso de GPUs (*Graphics Processing Unit*, unidades de processamento gráfico) é um caminho possível a se seguir para diminuir o tempo das simulações, mas não tivemos a possibilidade de testá-lo até o momento.

Pudemos também visualizar os resultados fornecidos pela Dinâmica de Formas quanto às setas do tempo. A complexidade é uma forma interessante de resumir o comportamento do sistema como um todo, e também pode ser um indicador da estabilidade de um sistema de N -corpos para valores de $E < 0$ ainda não totalmente explorados.

Em suma, a simulação numérica do Problema de N-Corpos Gravitacional é uma área matematicamente rica e profunda, e os resultados deste trabalho, como apresentado nesta seção, trouxeram ainda mais questões e novas possibilidades do que respostas. Há muitos caminhos a seguir, e simular numericamente o PNCG é uma prática que, sem dúvidas, ainda persistirá em desenvolvimento por muito tempo.

Apêndice A

Problemas-modelo para as simulações

Para testar os métodos numéricos e os resultados teóricos apresentados utilizamos dez conjuntos de valores iniciais, alguns obtidos na literatura e outros sorteados utilizando o método da seção 5.2.

O problema-modelo A.1 é um problema planar de três corpos com trajetórias periódicas e coincidentes, na forma de uma lemniscata. Por sua periodicidade e coincidência de órbitas, permite fácil validação de integradores de baixa ordem, tendo sido utilizado com esse propósito.

O segundo problema-modelo (A.2) foi um conjunto de valores amplamente utilizados no início das simulações numéricas do PNCG, tomado como o padrão internacional para que as simulações de diferentes pesquisadores pudessem ser comparadas. Trata-se de um problema de 25 corpos com massas iguais e que somam 1, velocidades nulas e com energia total $E = -0.2$. Os valores iniciais foram obtidos em [LECAR, 1968](#).

Todos os outros problemas foram utilizados na seção 5.5 para verificar o comportamento da complexidade com diferentes valores de N e de E . Os problemas com $N \geq 20$ não têm todas as suas coordenadas apresentadas devido à grande quantidade de números, mas constam no repositório <https://github.com/potalej/gravidade-fortran> (POTALEJ, 2024).

Problema-modelo A.1 (Lemniscata, [CHENCINER](#) e [MONTGOMERY](#), 2000). *Massas $m_i = 1$, $i = 1, 2, 3$. Posições e momentos na tabela A.1.*

x	y	p_x	p_y
-0,97000436	0,24308753	0,466203685	0,432365730
0,00000000	0,00000000	-0,932407370	-0,864731460
0,97000436	-0,24308753	0,466203685	0,432365730

Tabela A.1: Posições iniciais para o problema-modelo A.1.

Problema-modelo A.2 (IAU-25, [LECAR](#), 1968). *Massas $m_i = 0.04$, $i = 1, 2, \dots, 25$. Momentos $p_i = 0$, $i = 1, 2, \dots, 25$. Posições na tabela A.2.*

X	Y	Z
-1,4353390192091580	-1,1960803949975350	-1,0409170384164410
-1,6009182256333800	-1,4332684568698040	-0,3203325578291813
-0,6682692693377202	-1,8326196145310540	1,7565546374562050
-1,0063297271085620	-0,4420086005314779	-1,3066489880449010
-1,2861999857967320	-0,5936998210709894	0,0291159895399268
-1,7097408863389090	-0,6341243127807427	1,7101551770570280
-1,5154297181533500	1,4998409496072740	-0,9165560967404586
-1,7579941531617090	0,5824981279415633	-0,5439513791077954
-1,0208581796682660	1,2454325238460890	0,6230107693204201
0,3623578617252796	-1,4626398567914400	-1,3470562256997000
-0,2618528693473776	-1,1804901980656290	0,2407017637492819
0,6764824947854864	-1,5359881228369200	0,7148086953996702
0,6975692665009510	0,5492508713153734	-1,0741402835499970
-0,2388485232971104	-0,5528089412016879	0,0767733810865814
-0,3928864394947292	-0,2839307266676437	1,4070801273002260
0,3589534492431743	1,7029371039803980	-0,8184139363588995
-0,1150350974819667	1,8011434456014720	-0,1213591805860549
2,0003028409738270	-1,4805873132847380	-0,5041596816100792
1,4143208957551690	-0,3328032362360006	-1,7751938564012000
1,3760128181466750	-0,4872759065570369	0,0766751146777797
1,9447105162177940	0,1861730047015689	1,4242114141266000
1,0096407919813090	1,2009476099113470	-1,9092642651802620
1,6590277557130920	1,0141117922747310	0,2545976317092354
1,1381616430515150	1,8549467699720460	1,6884467595242860
0,3721617599346991	1,8110433032708357	1,6758620285777291

Tabela A.2: Posições iniciais para o problema-modelo A.2.

Problema-modelo A.3 (3 Corpos e constantes nulas). Massas $m_1 = m_2 = m_3 = 1$, posições e momentos lineares na tabela A.3.

x	y	p_x	p_y
-0,97000436	0,24308753	0,655526120	0,607946780
0,00000000	0,00000000	-1,311052250	-1,215893570
0,97000436	-0,24308753	0,796135510	0,607946780

Tabela A.3: Posições e velocidades iniciais para o problema-modelo A.3.

Problema-modelo A.4 (3 Corpos, constantes nulas exceto $E > 0$). Massas $m_1 = m_2 = m_3 = 1$, posições e momentos lineares na tabela A.4

x	y	p_x	p_y
-1,11290666	-0,10354093	0,5364555890	1,064540490
0,00000000	0,76488086	-0,964776330	-1,161569920
1,11290666	-0,66133993	0,428320440	0,097029430

Tabela A.4: Posições e velocidades iniciais para o problema-modo A.4.

Problema-modo A.5 (20 corpos). Trata-se de um problema com $N = 20$, todas as integrais primeiras nulas e massas diferentes. As posições e momentos lineares podem ser visualizados na figura A.1.

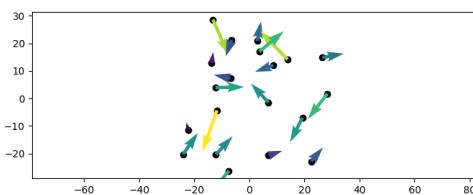


Figura A.1: Posições e momentos do problema-modo A.5.

Problema-modo A.6 (100 corpos). Trata-se de um problema com $N = 10^2$, todas as integrais primeiras nulas e massas iguais a 10^{-2} . As posições e momentos lineares podem ser visualizados na figura A.2.

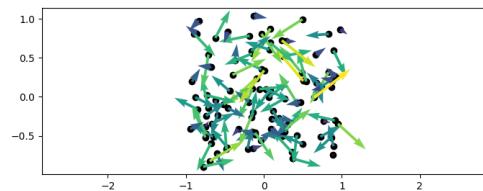


Figura A.2: Posições e momentos do problema-modo A.6.

Problema-modo A.7 (1000 corpos e $E = -0.25$). Trata-se de um problema com $N = 10^3$, $E = -0.25$, todas as outras integrais primeiras nulas e massas iguais a 10^{-3} . As posições e momentos lineares podem ser visualizados na figura A.3.

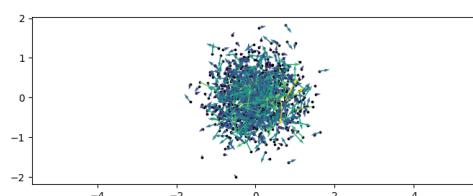


Figura A.3: Posições e momentos do problema-modo A.7.

Problema-modelo A.8 (1000 corpos e $E = 0$). Trata-se de um problema com $N = 10^3$, todas as integrais primeiras nulas e massas iguais a 10^{-3} . As posições e momentos lineares podem ser visualizados na figura A.4.

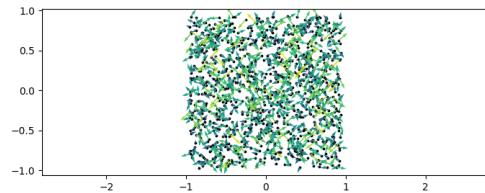


Figura A.4: Posições e momentos do problema-modelo A.8.

Problema-modelo A.9 (1000 corpos e $E = 0.25$ (massas iguais)). Trata-se de um problema com $N = 10^3$, $E = 0.25$, todas as outras integrais primeiras nulas e massas iguais a 10^{-3} . As posições e momentos lineares podem ser visualizados na figura A.5.

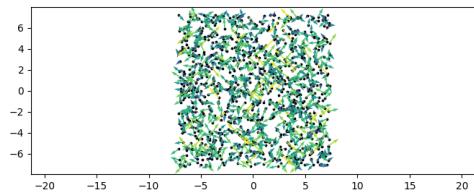


Figura A.5: Posições e momentos do problema-modelo A.9.

Problema-modelo A.10 (1000 corpos e $E = 0.25$ (massas diferentes)). Trata-se de um problema com $N = 10^3$, $E = 0.25$, todas as outras integrais primeiras nulas e massas diferentes. As posições e momentos lineares podem ser visualizados na figura A.6.

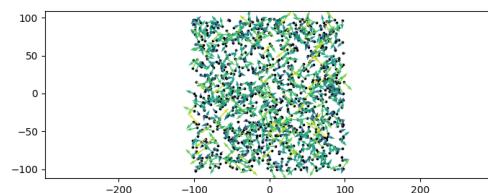


Figura A.6: Posições e momentos do problema-modelo A.10.

Apêndice B

Demonstrações de propriedades da Dinâmica de Formas

Em vias de facilitar a leitura e compreensão da teoria da Dinâmica de Formas para o PNCG, algumas demonstrações não foram apresentadas no corpo do texto. Porém, como tratam-se de resultados importantes para a teoria e cuja demonstração não foi publicada na literatura, vale apresentá-las neste apêndice.

Proposição B.0.1 (Equação 3.21). *Para as coordenadas objetivas (σ, π) , valem as propriedades*

$$\begin{aligned} \sum_{a=1}^N \sigma_a \cdot \sigma_a &= 1, & \sum_{a=1}^N \pi^a \cdot \sigma_a &= 0, \\ \sum_{a=1}^N \sqrt{m_a} \sigma_a &= 0, & \sum_{a=1}^N \sqrt{m_a} \pi^a &= 0. \end{aligned} \tag{B.1}$$

Demonstração.

$$\sum_{a=1}^N \sigma_a \cdot \sigma_a = \frac{1}{R^2} \sum_{a=1}^N m_a \mathbf{q}_a \cdot \mathbf{q}_a = \frac{R^2}{R^2} = 1.$$

$$\sum_a \pi^a \cdot \sigma_a = \frac{R}{D_0} \frac{1}{R} \sum_a \frac{\mathbf{p}_{cm}^a}{\sqrt{m_a}} \sqrt{m_a} \mathbf{q}_a^{cm} - \frac{D}{D_0} \sum_a \sigma_a \cdot \sigma_a = \frac{D}{D_0} - \frac{D}{D_0} = 0.$$

$$\sum_a \sqrt{m_a} \sigma_a = \frac{1}{R} \sum_a m_a \mathbf{q}_a = \frac{1}{R} \sum_a m_a \mathbf{q}_a = \mathbf{0}.$$

$$\sum_a \sqrt{m_a} \pi^a = \frac{R}{D_0} \sum_a \frac{\sqrt{m_a}}{\sqrt{m_a}} \mathbf{p}^a - \frac{D}{D_0} \sum_a \sqrt{m_a} \sigma_a = \mathbf{0}.$$

□

Proposição B.0.2 (Invariância por escala, equação 3.22). *As coordenadas objetivas $(\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\sigma})$ são invariantes por escala, pois comutam com D e com R ,*

$$\{f(D, R), \boldsymbol{\pi}_a\} = \{f(D, R), \boldsymbol{\sigma}_a\} = 0.$$

Demonstração. Primeiro, observe que \boldsymbol{x} comutar com $f(D, R)$ equivale a \boldsymbol{x} comutar com D e com R :

$$\begin{aligned} \{f(D, R), \boldsymbol{x}\} &= \sum_a \frac{\partial f(D, R)}{\partial \boldsymbol{q}_a} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{p}^a} - \frac{\partial f(D, R)}{\partial \boldsymbol{p}^a} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{q}_a} \\ &= \sum_a \left[\frac{\partial f}{\partial D} \frac{\partial D}{\partial \boldsymbol{q}_a} + \frac{\partial f}{\partial R} \frac{\partial R}{\partial \boldsymbol{q}_a} \right] \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{p}^a} - \left[\frac{\partial f}{\partial D} \frac{\partial D}{\partial \boldsymbol{p}^a} + \frac{\partial f}{\partial R} \frac{\partial R}{\partial \boldsymbol{p}^a} \right] \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{q}_a} \\ &= \frac{\partial f}{\partial D} \sum_a \left[\frac{\partial D}{\partial \boldsymbol{q}_a} \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{p}^a} - \frac{\partial D}{\partial \boldsymbol{p}^a} \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{q}_a} \right] + \frac{\partial f}{\partial R} \sum_a \left[\frac{\partial R}{\partial \boldsymbol{q}_a} \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{p}^a} - \frac{\partial R}{\partial \boldsymbol{p}^a} \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{q}_a} \right] \\ &= \frac{\partial f}{\partial D} \{D, \boldsymbol{x}\} + \frac{\partial f}{\partial R} \{R, \boldsymbol{x}\}. \end{aligned}$$

Assim, basta verificar as comutatividades individuais. Temos as derivadas parciais:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_a}{\partial \boldsymbol{q}_b} &= \frac{\sqrt{m_a}}{R^2} \left(\delta_a^b R - \frac{m_b}{R} \boldsymbol{q}_a \cdot \boldsymbol{q}_b \right), \quad \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_a}{\partial \boldsymbol{p}_b} = 0, \quad \frac{\partial \boldsymbol{\pi}^a}{\partial \boldsymbol{p}_b} = \frac{R}{\sqrt{m_a}} \delta_a^b - \boldsymbol{q}_b \cdot \boldsymbol{\sigma}_a, \\ \frac{\partial \boldsymbol{\pi}^a}{\partial \boldsymbol{q}_b} &= \frac{m_b}{\sqrt{m_a}} R \boldsymbol{p}^a \cdot \boldsymbol{q}_b - \boldsymbol{p}^a \cdot \boldsymbol{\sigma}_a - \frac{D \sqrt{m_a}}{R^2} \left(\delta_a^b R - \frac{m_b}{R} \boldsymbol{q}_a \cdot \boldsymbol{q}_b \right). \end{aligned}$$

Então:

$$\begin{aligned} \{D, \boldsymbol{\sigma}_a\} &= \sum_i \boldsymbol{p}^i \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_a}{\partial \boldsymbol{p}^i} - \boldsymbol{r}_i \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_a}{\partial \boldsymbol{r}_i} = - \sum_i \boldsymbol{r}_i \frac{\sqrt{m_a}}{R^2} \left(\delta_a^i R - \frac{m_i}{R} \boldsymbol{q}_a \cdot \boldsymbol{r}_i \right) \\ &= - \frac{\sqrt{m_a}}{R} \boldsymbol{q}_a + \frac{\sqrt{m_a}}{R} \boldsymbol{q}_a \sum_i \frac{m_i \boldsymbol{r}_i \cdot \boldsymbol{r}_i}{R^2} = - \frac{\sqrt{m_a}}{R} \boldsymbol{q}_a + \frac{\sqrt{m_a}}{R} \boldsymbol{q}_a \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_i = 0. \end{aligned}$$

$$\{R, \boldsymbol{\sigma}_a\} = \sum_i \frac{\partial R}{\partial \boldsymbol{r}_i} \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_a}{\partial \boldsymbol{p}^i} - \frac{\partial R}{\partial \boldsymbol{p}^i} \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_a}{\partial \boldsymbol{r}_i} = 0.$$

$$\begin{aligned} \{D, \boldsymbol{\pi}^a\} &= \sum_i \boldsymbol{p}^i \left(\frac{R}{\sqrt{m_a}} \delta_a^i - \boldsymbol{r}_i \boldsymbol{\sigma}_a \right) - \boldsymbol{r}_i \frac{\partial \boldsymbol{\pi}_a}{\partial \boldsymbol{q}_i} = \boldsymbol{\pi}^a - \frac{R}{\sqrt{m_a}} \boldsymbol{p}^a \sum_i \|\boldsymbol{\sigma}_i\|^2 - \frac{D \sqrt{m_a}}{R} \boldsymbol{q}_a \sum_i \|\boldsymbol{\sigma}_i\|^2 \\ &= \boldsymbol{\pi}^a - \frac{R}{\sqrt{m_a}} \boldsymbol{p}^a - \frac{D \sqrt{m_a}}{R} \boldsymbol{q}_a = \boldsymbol{\pi}^a - \boldsymbol{\pi}^a = 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\{R, \boldsymbol{\pi}^a\} &= \sum_i \frac{\partial R}{\partial \mathbf{r}_i} \frac{\partial \boldsymbol{\pi}^a}{\partial p^i} - \frac{\partial R}{\partial p^i} \frac{\partial \boldsymbol{\pi}^a}{\partial \mathbf{r}_i} = \sum_i \frac{m_i \mathbf{r}_i}{R} \left(\frac{R}{\sqrt{m_a}} \delta_a^i - \mathbf{r}_i \boldsymbol{\sigma}_a \right) \\
&= \sqrt{m_a} \mathbf{q}_a - \boldsymbol{\sigma}_a \sum_i \frac{m_i \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i}{R} = \sqrt{m_a} \mathbf{q}_a - R \boldsymbol{\sigma}_a \sum_i \|\boldsymbol{\sigma}_i\|^2 \\
&= R(\boldsymbol{\sigma}_a - \boldsymbol{\sigma}_a) = 0.
\end{aligned}$$

Assim, obtivemos que

$$\{D, \boldsymbol{\sigma}_a\} = \{D, \boldsymbol{\pi}^a\} = \{R, \boldsymbol{\sigma}_a\} = \{R, \boldsymbol{\pi}^a\} = 0.$$

□

Referências

- [AARSETH 2003] Sverre J. AARSETH. *Gravitational N-Body Simulations: Tools and Algorithms*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics. Cambridge: Cambridge University Press, 2003. ISBN: 978-0-521-43272-6. DOI: [10.1017/CBO9780511535246](https://doi.org/10.1017/CBO9780511535246) (citado nas pgs. 27, 35, 80, 93).
- [AARSETH 2024] Sverre J. AARSETH. *NBODY Codes*. Acessado em: 15 out. 2024. 2024. URL: <https://people.ast.cam.ac.uk/~sverre/web/pages/nbody.htm> (citado na pg. 27).
- [ANDERSON *et al.* 1999] E. ANDERSON *et al.* *LAPACK Users' Guide*. Third. Philadelphia, PA: Society for Industrial e Applied Mathematics, 1999. ISBN: 0-89871-447-8 (paperback) (citado na pg. 68).
- [ARNOLD 2013] V I ARNOLD. *Mathematical methods of classical mechanics*. en. 1978^a ed. Graduate texts in mathematics. New York, NY: Springer, nov. de 2013 (citado nas pgs. 12, 16, 17).
- [ASSIS 1998] André Koch Torres ASSIS. *Mecânica Relacional*. 1ed. Vol. 22. CLE. Campinas: Centro de Lógica, Epistemologia e História da Ciência - Unicamp, 1998 (citado na pg. 36).
- [BARBOUR 2003] Julian BARBOUR. “Scale-invariant gravity: particle dynamics”. Em: *Classical and Quantum Gravity* 20.8 (mar. de 2003), pgs. 1543–1570. ISSN: 1361-6382. DOI: [10.1088/0264-9381/20/8/310](https://doi.org/10.1088/0264-9381/20/8/310). URL: <http://dx.doi.org/10.1088/0264-9381/20/8/310> (citado na pg. 28).
- [BARBOUR 2012] Julian BARBOUR. “Shape dynamics: an introduction”. Em: *Quantum Field Theory and Gravity*. Springer Basel, 2012, pgs. 257–297. ISBN: 9783034800433. DOI: [10.1007/978-3-0348-0043-3_13](https://doi.org/10.1007/978-3-0348-0043-3_13) (citado na pg. 36).
- [BARBOUR 2014] Julian BARBOUR. “Kepler and mach's principle”. Em: *General Relativity, Cosmology and Astrophysics*. Springer International Publishing, 2014, pgs. 3–32. ISBN: 9783319063492. DOI: [10.1007/978-3-319-06349-2_1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-06349-2_1) (citado na pg. 36).
- [BARBOUR, KOSLOWSKI *et al.* 2013] Julian BARBOUR, Tim KOSLOWSKI e Flavio MERCATI. *A Gravitational Origin of the Arrows of Time*. 2013. arXiv: [1310.5167 \[gr-qc\]](https://arxiv.org/abs/1310.5167). URL: <https://arxiv.org/abs/1310.5167> (citado nas pgs. 36, 38).

- [BARBOUR, KOSLOWSKI *et al.* 2014a] Julian BARBOUR, Tim KOSLOWSKI e Flavio MERCATI. “Identification of a gravitational arrow of time”. Em: *Physical Review Letters* 113.18 (out. de 2014). ISSN: 1079-7114. DOI: [10.1103/physrevlett.113.181101](https://doi.org/10.1103/physrevlett.113.181101) (citado nas pgs. 2, 36, 38).
- [BARBOUR, KOSLOWSKI *et al.* 2014b] Julian BARBOUR, Tim KOSLOWSKI e Flavio MERCATI. “The solution to the problem of time in shape dynamics”. Em: *Classical and Quantum Gravity* 31.15 (jul. de 2014), pg. 155001. ISSN: 1361-6382. DOI: [10.1088/0264-9381/31/15/155001](https://doi.org/10.1088/0264-9381/31/15/155001) (citado na pg. 36).
- [BARBOUR, LOSTAGLIO *et al.* 2013] Julian BARBOUR, Matteo LOSTAGLIO e Flavio MERCATI. “Scale anomaly as the origin of time”. Em: *General Relativity and Gravitation* 45.5 (abr. de 2013), pgs. 911–938. ISSN: 1572-9532. DOI: [10.1007/s10714-013-1516-y](https://doi.org/10.1007/s10714-013-1516-y) (citado na pg. 39).
- [BOEKHOLT e PORTEGIES ZWART 2015] Tjarda BOEKHOLT e Simon PORTEGIES ZWART. “On the reliability of n-body simulations”. Em: *Computational Astrophysics and Cosmology* 2.1 (mar. de 2015). ISSN: 2197-7909. DOI: [10.1186/s40668-014-0005-3](https://doi.org/10.1186/s40668-014-0005-3). URL: <http://dx.doi.org/10.1186/s40668-014-0005-3> (citado na pg. 2).
- [BUTCHER 2016] J C BUTCHER. *Numerical methods for ordinary differential equations*. en. 3^a ed. Nashville, TN: John Wiley & Sons, ago. de 2016 (citado nas pgs. 43, 50, 55).
- [CHENCINER e MONTGOMERY 2000] Alain CHENCINER e Richard MONTGOMERY. “A remarkable periodic solution of the three-body problem in the case of equal masses”. Em: *The Annals of Mathematics* 152.3 (nov. de 2000), pg. 881. ISSN: 0003-486X. DOI: [10.2307/2661357](https://doi.org/10.2307/2661357). URL: <http://dx.doi.org/10.2307/2661357> (citado na pg. 95).
- [EINSTEIN 1981] Albert EINSTEIN. *Como Vejo o Mundo*. 1ed. Rio de Janeiro: Nova Fronteira, 1981 (citado na pg. 36).
- [ERICSON 2005] Christer ERICSON. *Real-Time Collision Detection*. Elsevier, 2005 (citado na pg. 80).
- [FENG e QIN 2010] Kang FENG e Mengzhao QIN. *Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems*. Springer Berlin Heidelberg, 2010. ISBN: 9783642017773. DOI: [10.1007/978-3-642-01777-3](https://doi.org/10.1007/978-3-642-01777-3). URL: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-01777-3> (citado na pg. 12).
- [FOREST e RUTH 1990] Etienne FOREST e Ronald D. RUTH. “Fourth-order symplectic integration”. Em: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 43.1 (mai. de 1990), pgs. 105–117. ISSN: 0167-2789. DOI: [10.1016/0167-2789\(90\)90019-l](https://doi.org/10.1016/0167-2789(90)90019-l). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0167-2789\(90\)90019-l](http://dx.doi.org/10.1016/0167-2789(90)90019-l) (citado na pg. 59).
- [FRIEDLANDER 1994] Ana FRIEDLANDER. *Elementos de programação não-linear*. Coleção manuais. Campinas: Editora da UNICAMP, 1994. ISBN: 9788526803046 (citado na pg. 65).

REFERÊNCIAS

- [HAIRER *et al.* 2006] Ernst HAIRER, Christian LUBICH e Gerhard WANNER. *Geometric numerical integration*. en. 2^a ed. Springer Series in Computational Mathematics. Berlin, Germany: Springer, fev. de 2006 (citado nas pgs. 43, 48, 49, 58, 60, 61).
- [HARRIS *et al.* 2020] Charles R. HARRIS *et al.* “Array programming with NumPy”. Em: *Nature* 585 (2020), pgs. 357–362. DOI: [10.1038/s41586-020-2649-2](https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2) (citado na pg. 68).
- [HEGGIE e MATHIEU 1986] D. C. HEGGIE e R. D. MATHIEU. “Standardised units and time scales”. Em: *The Use of Supercomputers in Stellar Dynamics*. Springer Berlin Heidelberg, 1986, pgs. 233–235. ISBN: 9783540171966. DOI: [10.1007/bfb0116419](https://doi.org/10.1007/bfb0116419). URL: <http://dx.doi.org/10.1007/BFb0116419> (citado na pg. 78).
- [HÉNON 1972] M. HÉNON. “The monte carlo method”. Em: *Gravitational N-Body Problem*. Springer Netherlands, 1972, pgs. 406–422. ISBN: 9789401028707. DOI: [10.1007/978-94-010-2870-7_39](https://doi.org/10.1007/978-94-010-2870-7_39). URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-94-010-2870-7_39 (citado na pg. 78).
- [HOLMBERG 1941] Erik HOLMBERG. “On the clustering tendencies among the nebulae. ii. a study of encounters between laboratory models of stellar systems by a new integration procedure.” Em: *The Astrophysical Journal* 94 (nov. de 1941), pg. 385. ISSN: 1538-4357. DOI: [10.1086/144344](https://doi.org/10.1086/144344). URL: <http://dx.doi.org/10.1086/144344> (citado na pg. 1).
- [KOTOVYCH e BOWMAN 2002] Oksana KOTOVYCH e John C BOWMAN. “An exactly conservative integrator for then-body problem”. Em: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 35.37 (set. de 2002), pgs. 7849–7863. ISSN: 0305-4470. DOI: [10.1088/0305-4470/35/37/301](https://doi.org/10.1088/0305-4470/35/37/301). URL: <http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/35/37/301> (citado na pg. 43).
- [LECAR 1968] M. LECAR. “Bull.astr. 3, 91 in: colloque sur le problème gravitationnel des n corps”. Em: *Bulletin d’Astronomie* 3 (1968), pg. 91 (citado na pg. 95).
- [LEIMKUHLER e REICH 2005] Benedict LEIMKUHLER e Sebastian REICH. *Simulating Hamiltonian Dynamics*. Cambridge University Press, fev. de 2005. ISBN: 9780511614118. DOI: [10.1017/cbo9780511614118](https://doi.org/10.1017/cbo9780511614118). URL: <http://dx.doi.org/10.1017/CBO9780511614118> (citado nas pgs. 43, 58, 60, 61).
- [MARCHAL e SAARI 1976] Christian MARCHAL e Donald Gene SAARI. “On the final evolution of the n-body problem”. Em: *Journal of Differential Equations* 20.1 (jan. de 1976), pgs. 150–186. ISSN: 0022-0396. DOI: [10.1016/0022-0396\(76\)90101-7](https://doi.org/10.1016/0022-0396(76)90101-7). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0022-0396\(76\)90101-7](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0396(76)90101-7) (citado na pg. 40).
- [MILLER 1964] R. H. MILLER. “Irreversibility in small stellar dynamical systems.” Em: *The Astrophysical Journal* 140 (jul. de 1964), pg. 250. ISSN: 1538-4357. DOI: [10.1086/147911](https://doi.org/10.1086/147911). URL: <http://dx.doi.org/10.1086/147911> (citado na pg. 2).

- [NACOZY 1972] Paul E. NACOZY. “The use of integrals in numerical integrations of the n-body problem”. Em: *Gravitational N-Body Problem*. Springer Netherlands, 1972, pgs. 153–164. ISBN: 9789401028707. DOI: [10.1007/978-94-010-2870-7_18](https://doi.org/10.1007/978-94-010-2870-7_18). URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-94-010-2870-7_18 (citado nas pgs. 63, 83).
- [OKUNBOR e SKEEL 1994] Daniel I. OKUNBOR e Robert D. SKEEL. “Canonical runge–kutta–nystrom methods of orders five and six”. Em: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 51.3 (jun. de 1994), pgs. 375–382. ISSN: 0377-0427. DOI: [10.1016/0377-0427\(92\)00119-t](https://doi.org/10.1016/0377-0427(92)00119-t). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0377-0427\(92\)00119-T](http://dx.doi.org/10.1016/0377-0427(92)00119-T) (citado na pg. 62).
- [OSSENDRIJVER 2016] Mathieu OSSENDRIJVER. “Ancient babylonian astronomers calculated jupiter’s position from the area under a time-velocity graph”. Em: *Science* 351.6272 (jan. de 2016), pgs. 482–484. ISSN: 1095-9203. DOI: [10.1126/science.aad8085](https://doi.org/10.1126/science.aad8085). URL: <http://dx.doi.org/10.1126/science.aad8085> (citado na pg. 1).
- [PERA GARCIA e BARROS 1995] Manuel Valentim de PERA GARCIA e Ivan Queiroz BARROS. *Mecanica analitica classica*. Edgard Blucher, 1995. URL: https://books.google.com.br/books?id=_cKjGwAACAAJ (citado nas pgs. 7, 9).
- [PONTZEN 2023] Andrew PONTZEN. *The universe in a box*. en. New York, NY: Riverhead Books, jun. de 2023 (citado na pg. 2).
- [POTALEJ 2024] Octavio Augusto POTALEJ. *gravidade-fortran*. 28 de out. de 2024. URL: <https://github.com/Potalej/gravidade-fortran> (citado nas pgs. 2, 68, 70, 94, 95).
- [PROJECT 2024] The OpenBLAS PROJECT. *OpenBLAS*. Acessado em: 10 jul. 2024. 2024. URL: <https://www.openblas.net/> (citado na pg. 68).
- [ROMA *et al.* s.d.] Alexandre Megiorin ROMA, Joyce da Silva BEVILACQUA e Rudimar Luiz Nós. *Métodos para a solução numérica de equações diferenciais ordinárias a valores iniciais*. pt (citado nas pgs. 43, 46, 47, 49, 50).
- [RUTH 1983] Ronald D. RUTH. “A canonical integrati0n technique”. Em: *IEEE Transactions on Nuclear Science* 30.4 (ago. de 1983), pgs. 2669–2671. ISSN: 0018-9499. DOI: [10.1109/tns.1983.4332919](https://doi.org/10.1109/tns.1983.4332919). URL: <http://dx.doi.org/10.1109/TNS.1983.4332919> (citado na pg. 59).
- [SAARI 1971] Donald Gene SAARI. “Improbability of collisions in newtonian gravitational systems”. Em: *Transactions of the American Mathematical Society* 162 (1971), pgs. 267–267. ISSN: 0002-9947. DOI: [10.1090/s0002-9947-1971-0295648-8](https://doi.org/10.1090/s0002-9947-1971-0295648-8). URL: <http://dx.doi.org/10.1090/s0002-9947-1971-0295648-8> (citado na pg. 31).
- [SHAMPINE 1986] L.F. SHAMPINE. “Conservation laws and the numerical solution of odes”. Em: *Computers and Mathematics with Applications* 12.5, Part 2 (1986), pgs. 1287–1296 (citado na pg. 63).

REFERÊNCIAS

- [SILVA 2001] Ana Cannas da SILVA. *Lectures on Symplectic Geometry*. en. Google-Books-ID: r9i6pXc7GEQC. Springer Science & Business Media, jul. de 2001. ISBN: 978-3-540-42195-5 (citado nas pgs. 12, 17, 19, 20).
- [TREFETHEN e BAU 1997] L.N. TREFETHEN e D. BAU. *Numerical Linear Algebra*. Other Titles in Applied Mathematics. Society for Industrial e Applied Mathematics, 1997. ISBN: 9780898713619. URL: https://books.google.com.br/books?id=4Mou5YpRD_kC (citado na pg. 82).
- [Tu 2010] Loring W. Tu. *An introduction to manifolds*. en. 2^a ed. Universitext. New York, NY: Springer, out. de 2010 (citado nas pgs. 10, 12, 15, 16).
- [VIRTANEN *et al.* 2020] Pauli VIRTANEN *et al.* “SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python”. Em: *Nature Methods* 17 (2020), pgs. 261–272. doi: [10.1038/s41592-019-0686-2](https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2). URL: <https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2> (citado na pg. 68).
- [VOLCHAN 2007] Sérgio VOLCHAN. Rio de Janeiro: Instituto Nacional de Matemática Pura e Estatística - IMPA, 2007 (citado nas pgs. 26, 34).
- [YOSHIDA 1990] Haruo YOSHIDA. “Construction of higher order symplectic integrators”. Em: *Physics Letters A* 150.5–7 (nov. de 1990), pgs. 262–268. ISSN: 0375-9601. doi: [10.1016/0375-9601\(90\)90092-3](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601(90)90092-3). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601\(90\)90092-3](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601(90)90092-3) (citado na pg. 59).