



PGF 5005 - Mecânica Clássica

Prof. Iberê L. Caldas

Primeiro Estudo Dirigido

2º semestre de 2015

1. Introdução à integração numérica de sistemas Hamiltonianos

A utilização de métodos numéricos pode acrescentar muito ao estudo de um determinado sistema dinâmico não integrável. Em particular, as técnicas de integração numérica possibilitam a determinação da evolução temporal em sistemas Hamiltonianos.

O objetivo do presente estudo dirigido é construir, progressivamente, integradores para sistemas Hamiltonianos, enfatizando as particularidades deste tipo de problema. Como aplicação dos programas desenvolvidos, integraremos equações de movimento correspondentes a funções Hamiltonianas com dois graus de liberdade. As trajetórias obtidas serão representadas por seções de Poincaré, as quais constituem uma técnica fundamental para a análise de sistemas com vários graus de liberdade.

Os programas do estudo dirigido podem ser desenvolvidos na linguagem de preferência do aluno. Além disto, os programas devem conter comentários de maneira a evidenciar a funcionalidade das linhas de comando.

2. Hamiltonianas separáveis

2.1. Integração numérica

O *método de Euler* representa a maneira mais elementar de realizar uma integração numérica em uma equação diferencial ordinária. Podemos descrever a implementação desta técnica numérica com a seguinte equação:

$$\mu^{(n+1)} = \mu^{(n)} + \Delta t \left. \frac{d\mu}{dt} \right|_{\mu^{(n)}}, \quad (1)$$

na qual $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_r)$, $\mu^{(n)} = \mu(n\Delta t)$ e Δt representa um passo fixo de tempo

No caso de sistemas Hamiltonianos descritos por variáveis canônicas, as equações de movimento possuem a seguinte forma:

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad \text{e} \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}.$$

Portanto, considerando que $\mu = (q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N)$ na equação (1), para $2N = r$, obtemos as relações que definem o método de Euler para um sistema Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} q_j^{(n+1)} &= q_j^{(n)} + \Delta t \left. \frac{\partial H}{\partial p_j} \right|_{(q^{(n)}, p^{(n)})}, \\ p_j^{(n+1)} &= p_j^{(n)} - \Delta t \left. \frac{\partial H}{\partial q_j} \right|_{(q^{(n)}, p^{(n)})}, \end{aligned} \quad (2)$$

nas quais $j = 1, 2, \dots, N$, $q = (q_1, q_2, \dots, q_N)$ e $p = (p_1, p_2, \dots, p_N)$.

2.1.1 Considerando a Hamiltoniana adimensional do pêndulo simples

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

escreva as expressões para $q^{(n+1)}$ e $p^{(n+1)}$ de acordo com a equação (2).

2.1.2 Realize a implementação computacional do método de Euler para resolver as equações de movimento do pêndulo simples. Anexe o código do programa desenvolvido ao seu trabalho. Utilize o título “Programa 1 - Equações de Euler para o pêndulo simples”.

- 2.1.3** A partir do programa desenvolvido no exercício anterior, construa as curvas de $q(t) \times t$ e $p(t) \times t$, considerando dois conjuntos de condições iniciais. Primeiramente, escolha uma condição inicial que resulte na libração do pêndulo. Anexe os resultados ao seu trabalho com o título “Figura 1 - Libração do pêndulo simples”. Em seguida, escolha uma condição inicial que resulte na rotação do pêndulo. Anexe os resultados ao seu trabalho com o título “Figura 2 - Rotação do pêndulo simples”. Em cada caso, utilize três valores distintos para o passo de tempo, $\Delta t = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}$, colocando as três curvas em um mesmo gráfico. Comente e compare os resultados, ou seja, avalie se as curvas obtidas são consistentes com o comportamento esperado para as variáveis $q(t)$ e $p(t)$ do pêndulo simples.
- 2.1.4** Verifique numericamente o comportamento da energia total do pêndulo simples. Com este objetivo, construa os gráficos de $E(t) \times t$ para as duas condições iniciais utilizadas no exercício **2.1.3**. Anexe o gráfico correspondente à libração do pêndulo com o título “Figura 3 - Energia de libração do pêndulo simples”. No caso da trajetória de rotação, anexe o gráfico resultante com o título “Figura 4 - Energia de rotação do pêndulo simples”. Utilize novamente três valores distintos para o passo de tempo, $\Delta t = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}$, colocando as três curvas obtidas em um mesmo gráfico. Comente e compare os resultados, ou seja, avalie se as curvas obtidas são compatíveis com o comportamento esperado para a energia total do sistema.
- 2.1.5** Construa os gráficos de $p(t) \times q(t)$ para as duas condições iniciais utilizadas nos itens anteriores. Anexe o gráfico correspondente à libração do pêndulo com o título “Figura 5 - Trajetória de libração do pêndulo simples”. No caso da trajetória de rotação, anexe o gráfico com o título “Figura 6 - Trajetória de rotação do pêndulo simples”. Em cada caso, utilize novamente os três tamanhos de passo de tempo, $\Delta t = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}$, colocando todas as três curvas em um mesmo gráfico. Comente e compare os resultados, ou seja, avalie se as trajetórias obtidas numericamente apresentam o comportamento esperado do pêndulo simples no espaço de fase.
- 2.1.6** Modifique o seu programa de maneira que, na aproximação para $p^{(n+1)}$, a derivada da Hamiltoniana seja calculada na posição $q^{(n+1)}$, em substituição ao valor de $q^{(n)}$. Ou seja, em seu integrador numérico para o pêndulo simples, substitua as equações (2) pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} q^{(n+1)} &= q^{(n)} + \Delta t \left. \frac{\partial H}{\partial p} \right|_{(q^{(n)}, p^{(n)})}, \\ p^{(n+1)} &= p^{(n)} - \Delta t \left. \frac{\partial H}{\partial q} \right|_{(q^{(n+1)}, p^{(n)})}. \end{aligned} \quad (3)$$

Observe que as equações anteriores devem ser implementadas na ordem indicada. Caso contrário, o valor de $q^{(n+1)}$ ficaria indefinido no cálculo de $p^{(n+1)}$.

Anexe o código deste novo programa ao seu trabalho. Utilize o título “Programa 2 - Equações modificadas de Euler para o pêndulo simples”.

- 2.1.7** Utilizando o programa desenvolvido no item anterior, repita os procedimentos do exercício **2.1.3**, ou seja, refaça os gráficos para $q(t) \times t$ e $p(t) \times t$. Para a condição inicial de libração do pêndulo, utilize o título “Figura 7 - Libração do pêndulo simples (versão modificada)”. No caso de rotação do pêndulo, coloque o título “Figura 8 - Rotação do pêndulo simples (versão modificada)”.
- 2.1.8** Empregando novamente o programa da questão **2.1.6**, repita os procedimentos do exercício **2.1.4**, ou seja, reproduza os gráficos para $E(t) \times t$. A figura correspondente à libração do pêndulo deve conter o título “Figura 9 - Energia de libração do pêndulo simples (versão modificada)”, ao passo que os resultados associados com a rotação do sistema devem ser acompanhados pelo título “Figura 10 - Energia de rotação do pêndulo simples (versão modificada)”.
- 2.1.9** Por fim, em analogia com o exercício **2.1.5**, utilize a versão modificada do método de Euler para construir novamente os gráficos de $p(t) \times q(t)$. Para a trajetória de libração do pêndulo, utilize o título “Figura 11 - Trajetória de libração do pêndulo simples (versão modificada)”. No caso de rotação, coloque o título “Figura 12 - Trajetória de rotação do pêndulo simples (versão modificada)”. Lembre-se que, em cada gráfico das questões **2.1.7**, **2.1.8** e **2.1.9**, três curvas distintas devem ser mostradas, correspondentes aos três valores do passo de tempo, $\Delta t = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}$. Nos exercícios **2.1.7**, **2.1.8** e **2.1.9**, avalie os resultados obtidos em comparação com os gráficos correspondentes dos itens **2.1.3**, **2.1.4** e **2.1.5**.

2.2. Integradores simpléticos

A alteração realizada sobre o programa, durante o exercício **2.1.6**, produz um efeito drástico sobre a aproximação numérica. Este resultado decorre do fato que o mapa (3) preserva uma importante propriedade estrutural das equações de Hamilton, as quais são caracterizadas como *simpléticas*. Ou seja, considerando três trajetórias separadas infinitesimalmente, designadas por $(p(t), q(t))$, $(p(t) + \delta p(t), q(t) + \delta q(t))$ e $(p(t) + \delta p'(t), q(t) + \delta q'(t))$, temos que a quantidade

$$\delta^2 a = \delta p \cdot \delta q' - \delta q \cdot \delta p',$$

conhecida como *área simplética diferencial*, é independente do tempo. No caso de sistemas Hamiltonianos com um único grau de liberdade, a quantidade $\delta^2 a$ pode ser identificada como a área de um paralelogramo infinitesimal, conforme mostrado na figura 1.

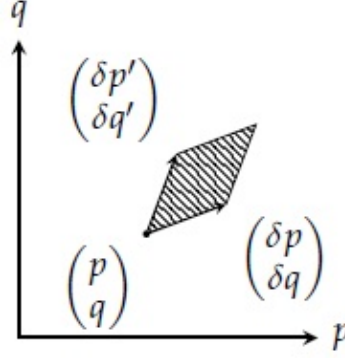


Figura 1: Área infinitesimal definida pelos vetores $(\delta p, \delta q)$ e $(\delta p', \delta q')$.

Em um espaço de fase bidimensional, a propriedade de conservação da área simplética coincide imediatamente com o teorema de Liouville, que determina a incompressibilidade do fluxo gerado por sistemas Hamiltonianos. Portanto, para verificar se um método de integração é simplético, precisamos apenas calcular o determinante Jacobiano do mapa que define o integrador numérico. Ou seja, no caso em que

$$|J| = \left| \frac{\partial(p^{(n+1)}, q^{(n+1)})}{\partial(p^{(n)}, q^{(n)})} \right| = 1,$$

podemos concluir que o mapa preserva áreas e, conseqüentemente, é simplético.

No presente estudo dirigido, consideraremos somente o caso de *Hamiltonianas separáveis*, de maneira que podemos escrever a seguinte relação:

$$H(p, q) = K(p) + U(q). \quad (4)$$

Como consequência da equação anterior, obtemos que

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{\partial K}{\partial p} = \dot{q}(p), \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial U}{\partial q} = \dot{p}(q). \end{aligned}$$

Observe que o pêndulo simples satisfaz as relações anteriores, ou seja, as derivadas da Hamiltoniana em relação a p ou q dependem somente da própria variável de derivação.

2.2.1 Considerando que a Hamiltoniana é separável e possui um único grau de liberdade, calcule os determinantes Jacobianos dos mapas (2) e (3). Desta forma, mostre que o método de Euler original não é simplético, ao passo que, com a introdução da modificação proposta, o método de integração torna-se simplético.

O método de integração correspondente ao mapa (3) é conhecido, apropriadamente, como *Euler simplético* (ou *Euler-Cromer*). Considerando um sistema Hamiltoniano com N graus de liberdade, o método de Euler simplético é descrito pelo seguinte mapa:

$$\begin{aligned} q_j^{(n+1)} &= q_j^{(n)} + \Delta t \left. \frac{\partial H}{\partial p_j} \right|_{(q^{(n+1)}, p^{(n)})}, \\ p_j^{(n+1)} &= p_j^{(n)} - \Delta t \left. \frac{\partial H}{\partial q_j} \right|_{(q^{(n+1)}, p^{(n)})}, \end{aligned} \quad (5)$$

no qual $q = (q_1, q_2, \dots, q_N)$, $p = (p_1, p_2, \dots, p_N)$ e $j = 1, 2, \dots, N$. Diferentemente do mapa (3), a definição (5) também é aplicável a Hamiltonianas não separáveis, as quais não serão abordadas neste estudo dirigido.

Para o aluno que deseja aprofundar seus conhecimentos sobre integradores simpléticos, indicamos os artigos apresentados nas referências **1** e **2**.

2.3. Aplicação: Hamiltoniana de Hénon-Heiles

Esta seção do estudo dirigido refere-se à Hamiltoniana apresentada no artigo de Hénon e Heiles (referência **3**), que descreve o movimento de uma estrela em uma galáxia com potencial gravitacional de simetria cilíndrica. A Hamiltoniana de Hénon-Heiles é dada pela expressão

$$H = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2 + q_1^2 + q_2^2) + q_1^2 q_2 - \frac{1}{3} q_2^3. \quad (6)$$

Observe que a Hamiltoniana anterior satisfaz a condição de separabilidade descrita pela equação (4).

2.3.1 Considerando a Hamiltoniana (6), obtenha as equações para $q^{(n+1)}$ e $p^{(n+1)}$ de acordo com o método de Euler simplético.

2.3.2 Realize a implementação computacional do método de Euler simplético. O programa desenvolvido será utilizado nos próximos exercícios para a construção de seções de Poincaré no plano $p_2 \times q_2$, considerando $q_1 = 0$ e $p_1 \geq 0$.

Em seu programa, de maneira complementar ao método de Euler simplético, implemente o algoritmo descrito por Hénon para a construção de seções de Poincaré (referência **4**). O algoritmo de Hénon está sumarizado no apêndice ao final do estudo dirigido.

Anexe o código do programa desenvolvido ao seu trabalho. Utilize o título “Programa 3 - Método de Euler simplético para a Hamiltoniana de Hénon-Heiles”.

2.3.3 Construa uma seção de Poincaré para trajetórias com energia total $E = 0.08333$. Anexe o gráfico obtido ao seu trabalho com o seguinte título: “Figura 13 - Seção de Poincaré para a Hamiltoniana de Hénon-Heiles ($E = 0.08333$)”. Observe que a figura elaborada no presente exercício corresponde à figura 4 do artigo de Hénon e Heiles.

2.3.4 Repita os procedimentos do item anterior para $E = 0.125$. Desta vez, utilize o título “Figura 14 - Seção de Poincaré para a Hamiltoniana de Hénon-Heiles ($E = 0.125$)”. Esta nova figura corresponde à figura 5 do artigo de Hénon e Heiles.

2.3.5 Escolha uma condição inicial correspondente a uma trajetória regular na seção de Poincaré com $E = 0.125$. Considerando a condição inicial escolhida, utilize o método de Euler simplético para a construção de uma figura com os valores de $q_1 \times t$, $p_1 \times t$, $q_2 \times t$ e $p_2 \times t$. Anexe o gráfico obtido ao seu trabalho sob o título “Figura 15 - Trajetória regular para a Hamiltoniana de Hénon-Heiles”. Com o propósito de permitir uma visualização adequada do comportamento regular nas curvas apresentadas, selecione cuidadosamente o intervalo total de integração temporal.

2.3.6 Repita os procedimentos do exercício anterior para uma condição inicial correspondente a uma trajetória caótica na seção de Poincaré com $E = 0.125$. Anexe o gráfico obtido sob o título “Figura 16 - Trajetória caótica para a Hamiltoniana de Hénon-Heiles”.

2.3.7 Repita novamente os procedimentos do exercício **2.3.3** para $E = 0.16667$. A figura elaborada deve ser anexada ao seu trabalho com o título “Figura 17 - Seção de Poincaré para a Hamiltoniana de Hénon-Heiles ($E = 0.16667$)”. Este gráfico corresponde à figura 6 do artigo de Hénon e Heiles.

3. Apêndice: cálculo de seções de Poincaré

De maneira geral, o cálculo numérico de seções de Poincaré é composto por duas partes. Primeiramente, precisamos de um método de integração, o qual utilizamos para obter as trajetórias do sistema dinâmico a partir de diversas condições iniciais. Esta primeira parcela do procedimento de construção de um mapa de Poincaré está representada no presente estudo dirigido pelo método de Euler simplético. A segunda parte do problema consiste na detecção e cálculo das interseções entre as trajetórias e a superfície Σ , a qual define a seção escolhida do espaço de fase. A proposta deste apêndice é apresentar o método de Hénon para a avaliação numérica destas interseções. Para o aluno interessado na exposição original do algoritmo de Hénon, indicamos a referência **4**.

Considere o seguinte sistema dinâmico autônomo em r dimensões:

$$\begin{aligned}\frac{d\mu_1}{dt} &= f_1(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_r), \\ \frac{d\mu_2}{dt} &= f_2(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_r), \\ &\vdots \\ \frac{d\mu_r}{dt} &= f_r(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_r).\end{aligned}\tag{7}$$

Sem perda de generalidade, podemos escolher as variáveis dinâmicas de modo que a superfície Σ é definida por

$$\mu_r = \mu_r^s,\tag{8}$$

onde μ_r^s representa um valor particular da variável μ_r . Agora, considere dois passos consecutivos do integrador numérico, representados por $\mu^{(n)}$ e $\mu^{(n+1)}$, para uma determinada condição inicial $\mu^{(0)}$. Podemos afirmar que esta trajetória específica do sistema dinâmico atravessa a superfície Σ , em algum ponto entre $\mu^{(n)}$ e $\mu^{(n+1)}$, no caso em que a seguinte condição é satisfeita:

$$(\mu_r^{(n+1)} - \mu_r^s)(\mu_r^{(n)} - \mu_r^s) < 0.\tag{9}$$

Empregando a relação anterior podemos detectar o cruzamento da trajetória com a superfície Σ . No entanto, os valores das variáveis $(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{r-1})$, no instante do cruzamento, permanecem desconhecidos. Além disto, também desconhecemos o valor de t na interseção entre a trajetória e a superfície.

Com o intuito de calcular os valores das variáveis dinâmicas no instante exato da interseção com a superfície Σ , utilizaremos de um simples artifício matemático: reformularemos o sistema dinâmico de maneira que a variável μ_r torne-se a variável independente. Ou seja, para $f_r \neq 0$ nas vizinhanças da interseção, podemos reescrever o sistema (7) no seguinte formato:

$$\begin{aligned}\frac{d\mu_1}{d\mu_r} &= \frac{f_1}{f_r}, \\ \frac{d\mu_2}{d\mu_r} &= \frac{f_2}{f_r}, \\ &\vdots \\ \frac{d\mu_{r-1}}{d\mu_r} &= \frac{f_{r-1}}{f_r}, \\ \frac{dt}{d\mu_r} &= \frac{1}{f_r}.\end{aligned}\tag{10}$$

Inserindo o sistema (10) em um integrador numérico, podemos determinar imediatamente os valores de interseção da trajetória com a superfície Σ . Este objetivo é alcançado com a utilização do seguinte passo de integração:

$$\Delta\mu_r = \mu_r^s - \mu_r^{(n)}.\tag{11}$$

Note que a equação anterior supõe a quantidade $\mu^{(n)}$ como o ponto de partida para a integração numérica do sistema (10).

Por fim, resumizamos as etapas para a construção numérica de uma seção de Poincaré na superfície Σ definida pela equação (8):

1. Escolha uma condição inicial $\mu^{(0)}$.
2. Utilize um integrador numérico para calcular a evolução temporal do sistema (7). A cada passo de tempo, realize a verificação da condição (9).
3. Sempre que a condição (9) for satisfeita, empregue o sistema (10) para a realização de um único passo de integração, cujo valor está indicado na equação (11). Neste caso, utilize as coordenadas $\mu^{(n)}$ como ponto de partida.
4. Após a integração com passo $\Delta\mu_r$, obtemos os valores $(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{r-1})$ que constituem a interseção da trajetória com a superfície Σ . Estes valores são utilizados na construção da seção de Poincaré.

5. Continue a integração numérica do sistema (7), a partir de $\mu^{(n+1)}$, até que uma nova interseção seja detectada.
6. A integração numérica da trajetória com condição inicial $\mu^{(0)}$ deve ser realizada por um longo período de tempo. Consequentemente, os procedimentos 2, 3, 4 e 5 serão repetidos diversas vezes.
7. Repita todos os procedimentos anteriores para várias condições iniciais. No caso de um sistema Hamiltoniano, escolha as novas condições iniciais na mesma superfície energética da primeira trajetória. Além disto, as novas condições iniciais devem ser escolhidas de maneira a explorar adequadamente o espaço de fase energeticamente acessível

4. Referências

- 1 T. J. Stuchi, “Symplectic Integrators Revisited”, *Brazilian Journal of Physics* **32**, 958-979 (2002).
- 2 H. Yoshida, “Construction of higher order symplectic integrators”, *Physics Letters A* **150**, 262-268 (1990).
- 3 M. Henon and C. Heiles, “The Applicability of the Third Integral of Motion: Some Numerical Experiments”, *The Astronomical Journal* **69**, 73-79 (1964).
- 4 M. Henon, “On the Numerical Computation of Poincaré Maps”, *Physica D* **5**, 412-414 (1982).