

Universidade do Minho

Departamento de Matemática para a Ciência e Tecnologia

**INTEGRAÇÃO GEOMÉTRICA E UMA
APLICAÇÃO À DINÂMICA MOLECULAR**

Marina Cláudia Martins dos Santos

Dissertação de Mestrado em Matemática e Aplicações à
Mecânica para a obtenção do grau de Mestre

Trabalho realizado sob orientação do Prof. Doutor
Jorge Figueiredo e do Prof. Doutor Gustavo Rodrigues Dias

Julho de 2007

RESUMO

Os sistemas hamiltonianos desempenham um papel central na integração geométrica, uma vez que muitos problemas em áreas tais como a mecânica, astronomia e dinâmica molecular têm estrutura hamiltoniana. A Hamiltoniana muitas vezes representa a energia total do sistema; de facto, se uma Hamiltoniana não depender explicitamente do tempo, então o seu valor é invariante e o sistema é conservativo. No entanto, os sistemas hamiltonianos não são, necessariamente, conservativos.

Integradores geométricos são métodos que conservam as propriedades qualitativas associadas às soluções do sistema hamiltoniano em estudo. O objectivo principal desta tese é estudar os métodos numéricos que pertencem à classe dos integradores geométricos. Inicialmente, introduz-se o conceito de integrador geométrico e sumariza-se algumas das vantagens e desvantagens do seu uso. Numa segunda fase, sintetiza-se a teoria básica dos sistemas lagrangianos e hamiltonianos. Posteriormente, faz-se uma revisão de alguns métodos numéricos, nomeadamente, os métodos de Euler e as suas variantes, a família Runge-Kutta e os métodos Störmer-Verlet e Newmark. A família Runge-Kutta é descrita com detalhe, em termos da sua caracterização em métodos explícitos, implícitos e particionados. De seguida, são ponderados os motivos que justificam o papel central que os métodos Störmer-Verlet e Newmark assumem na dinâmica molecular e estrutural, respectivamente.

É apresentada uma derivação variacional dos integradores numéricos e, também, feita uma selecção e classificação dos integradores numéricos que se incluem na classe dos integradores geométricos. O capítulo final é dedicado à simulação de um problema em dinâmica molecular; o problema é modelado pelas clássicas equações do movimento de Newton e quatro cenários diferentes são testados, sendo as equações do movimento integradas pelo método Störmer-Verlet.

ABSTRACT

Hamiltonian systems play a central role in geometric integration since many problems in areas such as mechanics, astronomy and molecular dynamics have a Hamiltonian structure. The Hamiltonian usually represents the total energy of the system; indeed, if a Hamiltonian does not explicitly depend on time, then its value is invariant and the system is conservative. More generally, however, Hamiltonian systems need not be conservative.

Geometric integrators are methods that conserve qualitative properties associated to the solutions of the Hamiltonian system under study. The main objective of this thesis is to study the numerical methods that belong to the class of geometric integrators. I first review the concept of geometric integration and summarise some of the advantages and disadvantages of its use. I then outline the basic theory for Lagrangian and Hamiltonian systems. I then summarise the known numerical integrators including Euler and its variants, the Runge-Kutta family, the Störmer-Verlet and Newmark methods. The Runge-Kutta family is described in detail in terms of characterising them as explicit, implicit and partitioned methods. This is followed by a discussion of the important roles that the Störmer-Verlet and Newmark methods assume in molecular and structural dynamics, respectively.

Next, I introduce a variational derivation of numerical integrators, and then classify those which are geometric integrators. The final chapter is dedicated to a problem in simulating molecular dynamics; the problem is modeled by the classic Newton equations of motion and four different scenarios are presented where the equations of motion are integrated by the Störmer-Verlet method.

Conteúdo

Resumo	i
Abstract	ii
Tabela de Conteúdos	iii
Agradecimentos	vii
Lista de Figuras	vii
Lista de Tabelas	x
1 Introdução	1
1.1 Qual o interesse da integração geométrica?	2
1.2 Exemplos comparativos de integradores clássicos vs. integradores geométricos	5
1.3 Quais as características qualitativas a preservar?	10
2 Sistemas hamiltonianos e lagrangianos	15
2.1 As equações de Euler-Lagrange e as equações de Hamilton	16
2.2 Leis de conservação	21
2.2.1 Lei de conservação da energia	21
2.2.2 Teorema de Noether	22

2.2.3	Simplecticidade	24
2.3	Sistemas forçados e com restrições	31
3	Métodos numéricos	36
3.1	Métodos de Euler: explícito, implícito e simplético	37
3.1.1	O método θ : métodos de Euler explícito e implícito	37
3.1.2	O método de Euler simplético	40
3.1.3	O método de Euler simplético em sistemas com restrições	40
3.2	Métodos Runge-Kutta: explícitos, implícitos e particionados	41
3.2.1	Métodos Runge-Kutta explícitos	41
3.2.2	Métodos Runge-Kutta implícitos	44
3.2.3	Métodos Runge-Kutta particionados	49
3.3	Método Störmer-Verlet	53
3.4	O Método Newmark	56
3.5	SHAKE e RATTLE	58
3.5.1	SHAKE	59
3.5.2	RATTLE	60
4	Integradores geométricos	62
4.1	As equações de Euler-Lagrange discretas e os sistemas hamiltonianos discretos	67
4.2	Leis de conservação em sistemas discretos	72
4.2.1	Conservação da 2-forma simplética	72
4.2.2	Conservação das funções quantidades de movimento	73
4.2.3	Conservação da energia	74
4.3	Sistemas discretos forçados	75
4.4	Sistemas discretos com restrições	78

4.5	Sistemas discretos forçados com restrições	79
4.6	A análise <i>backward</i> do erro	81
4.7	Os integradores geométricos	82
4.7.1	Os métodos de Euler simpléticos	83
4.7.2	A regra do ponto médio implícita	85
4.7.3	Métodos Runge-Kutta simpléticos	88
4.7.4	Métodos Runge-Kutta particionados	92
4.7.5	Métodos Runge-Kutta-Nyström	94
4.7.6	O método Störmer-Verlet	96
4.7.7	O método Newmark	102
4.7.8	SHAKE e RATTLE	104
5	Dinâmica Molecular	107
5.1	Potenciais intermoleculares	109
5.1.1	O potencial de Lennard-Jones	110
5.2	Condições iniciais	112
5.3	Condições fronteira	114
5.4	Cálculo da força e a utilização de listas	115
5.5	Leis de conservação	116
5.6	Integradores geométricos vs. Dinâmica molecular	117
5.6.1	Natureza dos sistemas dinâmicos moleculares	117
5.6.2	O método Störmer-Verlet na Dinâmica Molecular	119
5.6.3	Alternativas ao método Störmer-Verlet	120
5.7	Uma aplicação à dinâmica molecular	121
5.7.1	Configuração inicial	121

5.7.2	Função potencial	122
5.7.3	Equações do movimento	123
5.7.4	Simulações numéricas	123
5.7.5	Conclusões	141
6	Conclusões	143
6.1	Perspectivas de trabalho futuro	144
A	Abordagem geométrica da mecânica	146
A.1	Formas externas	146
A.2	Formas diferenciais	149
A.3	Variedades simplécticas e sistemas hamiltonianos	152
A.4	As funções quantidade de movimento	158
A.4.1	Variedades de Poisson, grupos e álgebras de Lie	158
A.4.2	As funções adjuntas, acção de um grupo e geradores infinitesimais .	160
A.4.3	Funções quantidade de movimento	164
A.5	Sistemas forçados	168
A.6	Sistemas com restrições	170
A.7	Sistemas forçados com restrições	171
	Bibliografia	174

Agradecimentos

A escrita desta tese só foi possível com o apoio e o contributo de várias pessoas. Agradeço ao Prof. Doutor Jorge Figueiredo e ao Prof. Doutor Gustavo Dias pela experiência única de ter sido orientada por eles.

Agradeço ao Jerry Marsden, Ben Leimkuhler, E. Noorizadeh e Ozgur Selsil pelos seus comentários e sugestões.

Agradeço ao Simone Calogero pela leitura atenta de partes do manuscrito e discussões pertinentes e ao Anwar Hussein pela ajuda com o Matlab.

Finalmente, agradeço à Nelinha e ao António Oliveira pela leitura da tese e pela amizade ao longo destes anos.

Lista de Figuras

1.1	Erro na energia no problema de Kepler com o método de Euler explícito, com o método Runge-Kutta de ordem 4 e com o método Störmer-Verlet, respectivamente; as condições iniciais são $\mathbf{q} = (1, 0)^T$ e $\mathbf{p} = (0, 1)^T$, com passo $h = 10^{-3}$	9
1.2	Erro no momento angular no problema de Kepler com o método de Euler explícito, com o método Runge-Kutta de ordem 4 e com o método Störmer-Verlet, respectivamente; as condições iniciais são $\mathbf{q} = (1, 0)^T$ e $\mathbf{p} = (0, 1)^T$, com passo $h = 10^{-3}$	9
1.3	Solução das equações (1.5) para os métodos de Euler explícito, implícito e simplético, com condição inicial $(u, v) = (2, 2)$ e $h = 0.1$	10
5.1	Potencial de Lennard-Jones, para $\sigma = 1$ e $\varepsilon = 1$	111
5.2	Célula de uma <i>lattice</i> do tipo fcc	122
5.3	Configuração inicial - <i>lattice</i> do tipo fcc com 108 partículas, com velocidades iniciais nulas	122
5.4	Configuração inicial - <i>lattice</i> do tipo fcc com 108 partículas, com «listas», estando apenas representadas 3 delas, com velocidades iniciais nulas	123
5.5	Configurações intermédias e final do cenário 1, com passo 10^{-4} ; o intervalo temporal considerado é $t \in [0, 1]$, visualizando-se as posições das partículas ao fim de 150, 500, 1000, 2000 e 10000 passos, respectivamente	124
5.6	Erro na energia do cenário 1, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente, ao longo de toda a simulação	125
5.7	Erro na energia do cenário 1, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente, na segunda metade da simulação	126

5.8	Evolução da energia cinética, energia potencial e energia total do cenário 1, com passo 10^{-4}	127
5.9	Evolução das componentes da quantidade de movimento linear, para os passos 10^{-3} (3 primeiras figuras) e 10^{-4} (3 últimas figuras), no cenário 1	127
5.10	Configurações intermédias e final do cenário 2, com passo 10^{-4} ; o intervalo temporal considerado é $t \in [0, 1]$, visualizando-se as posições das partículas ao fim de 150, 500, 1000, 2000 e 10000 passos, respectivamente	128
5.11	Configuração final do cenário 2, com passo 10^{-4} , com a totalidade das partículas	129
5.12	Erro na energia do cenário 2, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente, ao longo de toda a simulação	129
5.13	Erro na energia do cenário 2, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. No primeiro caso, entre os passos 300 e 3500 e, no segundo caso, para a segunda metade da simulação	130
5.14	Evolução da energia cinética, energia potencial e energia total do cenário 2, com passo 10^{-4}	131
5.15	Evolução das componentes da quantidade de movimento linear, para os passos 10^{-3} (3 primeiras figuras) e 10^{-4} (3 últimas figuras), no cenário 2	131
5.16	Configurações intermédias e final do cenário 3, com passo 10^{-5} ; o intervalo temporal considerado é $t \in [0, 1]$, visualizando-se as posições das partículas ao fim de 1500, 5000, 10000, 20000 e 100000 passos, respectivamente	132
5.17	Configuração final do cenário 3, com passo 10^{-5} , com a totalidade das partículas	133
5.18	Erro na energia do cenário 3, com passo 10^{-3} , 10^{-4} e 10^{-5} , respectivamente, ao longo de toda a simulação	133
5.19	Erro na energia do cenário 3, com passo 10^{-5} , a partir do passo 1000	134
5.20	Evolução da energia cinética, energia potencial e energia total do cenário 3, com passo 10^{-5}	135
5.21	Evolução das componentes da quantidade de movimento linear no cenário 3, para o passo 10^{-5}	135

5.22	Configurações intermédias e final do cenário 4, com passo 10^{-5} ; o intervalo temporal considerado é $t \in [0, 1]$, visualizando-se as posições das partículas ao fim de 1500, 5000, 10000, 20000 e 100000 passos, respectivamente	139
5.23	Configuração final do cenário 4, com passo 10^{-5} , com a totalidade das partículas	140
5.24	Erro na energia modificada no cenário 4, com passo 10^{-5} , respectivamente, ao longo de toda a simulação	140
5.25	Erro na energia modificada do cenário 4, com passo 10^{-5} , respectivamente, a partir do passo 200	141
5.26	Evolução das componentes da quantidade de movimento linear no cenário 4, para o passo 10^{-5}	141

Lista de Tabelas

3.1	Métodos Runge-Kutta de ordem 2	43
3.2	Método Runge-Kutta clássico	43
3.3	Método de Nyström	43
3.4	Método Runge-Kutta de ordem 4	44
3.5	Método Runge-Kutta implícito de ordem 2	45
3.6	Regra do ponto médio implícita	47
3.7	Método Runge-Kutta implícito de ordem 4	47
3.8	Método de Gauss-Legendre de ordem 6	47
3.9	Método Lobatto IIIA de ordem 4	48
3.10	Método Lobatto IIIB de ordem 4	48
4.1	Método Runge-Kutta implícito diagonal de ordem 5	91

Capítulo 1

Introdução

Muitos fenómenos físicos são descritos por equações diferenciais ordinárias ou por equações diferenciais parciais. Na maioria dos casos, a solução geral destas equações não é conhecida, recorrendo-se a métodos numéricos para determinar as suas soluções. Um método ou integrador numérico é um algoritmo que substitui uma equação diferencial, que descreve a dinâmica contínua de um sistema, por equações diferença que aproximam a trajectória verdadeira através de uma trajectória discreta. O leque de métodos numéricos disponíveis é variado, em particular, após o aparecimento e difusão do uso do computador. Nas últimas décadas, atingiu-se uma certa maturidade no campo da integração numérica de equações diferenciais ordinárias, sendo corrente o uso de excelentes algoritmos, na sua maioria baseados em métodos Runge-Kutta ou métodos lineares multipasso. Em geral, o ênfase de tais algoritmos clássicos é colocado na estabilidade do método e na solução de compromisso entre o controlo do erro e a eficiência computacional. O problema central na integração numérica tradicional de sistemas de equações diferenciais ordinárias é calcular a solução de um problema num dado instante de tempo t , dadas as condições iniciais, da forma mais eficiente possível, respeitando uma dada tolerância para o erro global. A classe do integrador, a sua ordem e erro local, assim como o passo temporal, são desenhados, construídos e escolhidos com este propósito. No entanto, os métodos tradicionais ignoram todas as leis físicas contidas pela equação diferencial que estão a integrar numericamente. Por exemplo, a segunda lei de Newton, $m \frac{d^2x}{dt^2} = F(t, x, \frac{dx}{dt})$, contém mais informação do que a relação entre massa, aceleração e força - contém todas as propriedades físicas relevantes - nomeadamente, informação sobre o espaço de fase, o qual pode ser o espaço

euclideano ou um espaço curvo; sobre simetrias do movimento, tais como as simetrias no movimento de um pêndulo; sobre quantidades, tais como a energia, indicando se são ou não conservadas; sobre a symplecticidade e a preservação do volume. Desde os finais dos anos 80 e início dos anos 90, o estudo e desenvolvimento de métodos numéricos que obedecem, também, às leis físicas escondidas, tem sido uma área de grande actividade e fértil em resultados.

Hoje em dia, a tecnologia disponível permite cálculos computacionais mais pesados, possibilitando soluções numéricas de longo prazo. Mas, o elevado número de passos, embora permita a obtenção de uma solução numérica no longo prazo, pode comprometer o sucesso da simulação. Em que sentido? Por exemplo, em sistemas dinâmicos hamiltonianos, atractores e repulsores no espaço de fase não são observáveis; no entanto, métodos tradicionais, tais como os métodos de Euler e de Runge-Kutta, quando aplicados a sistemas hamiltonianos, podem produzir trajectórias numéricas que implicam a existência de atractores e repulsores. Consequentemente, não é de estranhar a afirmação de que as propriedades qualitativas do integrador numérico são críticas para o sucesso da simulação [20].

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

1.1 Qual o interesse da integração geométrica?

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

Grosso modo, os métodos baseados na análise do erro não respeitam, necessariamente,

as características qualitativas do problema subjacente à equação diferencial original, ao passo que os integradores geométricos incorporam essa informação qualitativa. Em termos simples, pretende-se que um integrador numérico, ao cumprir a sua função tradicional, vá mais além, e reproduza, pelo menos, certas características do sistema original. Já não é suficiente que o integrador numérico se limite a apresentar uma solução numérica; ambiciona-se, também, que essa solução numérica partilhe as características do sistema contínuo subjacente. Neste sentido, diz-se que a integração geométrica é sinónimo de uma integração que preserva a estrutura das equações diferenciais, isto é, os integradores numéricos partilham algumas das propriedades geométricas do fluxo exacto do sistema. Há, de facto, alguns integradores já usados há décadas, tais como o Störmer-Verlet, que são também integradores geométricos; outros foram reajustados nesse sentido, ou então criados de raiz. Além da vantagem evidente da incorporação de características qualitativas, os integradores geométricos são, muitas vezes, mais eficientes e mais fáceis de analisar, já que se pode explorar a teoria qualitativa subjacente à equação diferencial, a partir da análise *backward* do erro. Neste sentido, uma consequência directa da integração geométrica é o estudo de um sistema dinâmico «vizinho» do sistema dinâmico original, e na «classe» correcta; por exemplo, se o sistema de equações diferenciais é hamiltoniano, o fluxo numérico será solução de um sistema hamiltoniano vizinho. Aliás, a grande justificação da integração geométrica reside na análise *backward* do erro. Grosso modo, esta ferramenta teórica escreve o integrador numérico ψ_h como o fluxo de algum campo vectorial perturbado \tilde{f} , ou seja, $\psi_h(f) = \varphi(\tilde{f})$, onde φ representa o fluxo verdadeiro - a solução numérica é a solução exacta de um problema modificado. Se o método for de ordem p , então $\tilde{f} = f + O(h^p)$; consequentemente, em muitos casos pode argumentar-se que, se ψ_h pertencer a alguma classe (por exemplo, hamiltoniana), então o campo vectorial perturbado também pertencerá à mesma classe. Desta forma, sabe-se que, ao estudar a dinâmica do integrador numérico, está a estudar-se, no mínimo, a dinâmica na classe correcta.

Os resultados obtidos tornaram evidente que a preservação das propriedades geométricas do fluxo, não só produz um comportamento qualitativo superior, como permite uma integração mais precisa no longo prazo. De facto, a preservação das propriedades qualitativas tem consequências indirectas, que têm sido observadas nos resultados obtidos ao longo

destes últimos vinte anos [28], nomeadamente:

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

Pelo facto de se explorar a estrutura dos sistemas mecânicos, é possível utilizar integradores mais atractivos do ponto de vista teórico, mas também mais eficientes em termos computacionais e que exibam melhores propriedades em simulações de longo prazo, do que os integradores convencionais [39].

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

As vantagens e desvantagens da integração geométrica podem ser sintetizadas da seguinte forma [28, 30]. As vantagens principais são:

1. As simulações podem ser feitas no longo prazo, já que efeitos não físicos, tais como dissipação de energia em sistemas conservativos, não têm lugar. Por exemplo, sistemas hamiltonianos preservam a energia, mas integradores simplécticos, em geral, não; no entanto, a análise *backward* permite concluir que, no longo prazo, o erro na energia oscila de forma limitada.
2. Integradores geométricos confiáveis, simples e rápidos podem ser obtidos através do estudo da estrutura da equação diferencial em causa. Adicionalmente, podem ser obtidos métodos mais estáveis e/ou mais precisos do que os integradores tradicionais.
3. Em algumas situações, os resultados são qualitativamente correctos, mesmo quando o movimento é caótico.
4. Para alguns sistemas, os erros são muito mais pequenos do que com os integradores convencionais, tanto no curto, no médio como no longo prazo. Embora os integradores geométricos não tenham sido desenhados para controlar o erro global, por

vezes ele cresce linearmente para um integrador simpléctico e de forma quadrática para um integrador clássico.

5. A preservação da estrutura pode produzir métodos mais robustos e que conduzam a melhores resultados qualitativos do que os métodos convencionais, mesmo se o erro numérico não for inferior.
6. A preservação da estrutura pode sugerir novas formas de computação consideradas impossíveis, como o é caso da integração de longo prazo de sistemas hamiltonianos.

O sumário das desvantagens é:

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

1.2 Exemplos comparativos de integradores clássicos vs. integradores geométricos

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

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

Admita-se que para a equação diferencial em estudo não é possível encontrar a forma geral das suas soluções. Neste caso, recorrem-se aos métodos numéricos, algoritmos que

permitem calcular soluções que aproximam o fluxo do sistema. O método numérico mais simples é o método de Euler explícito

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

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

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

designada por fluxo numérico.

Exemplo 1

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

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

Em termos qualitativos, as soluções deste sistema:

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

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

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

e

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

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

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

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

Exemplo 2

Um outro exemplo clássico é o do pêndulo, com massa unitária e um fio de massa desprezível com comprimento unitário [13, 28]. Este sistema de um grau de liberdade, com Hamiltoniana

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

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

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

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

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

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

Exemplo 3

O problema de Kepler descreve o movimento de um ponto material num plano, que é atraído em direcção à origem com uma força inversamente proporcional ao quadrado da

distância. A Hamiltoniana do sistema é [11, 12, 34]

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

ou seja

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

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

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

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

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

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

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

Exemplo 4

Considere-se, agora, o problema

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

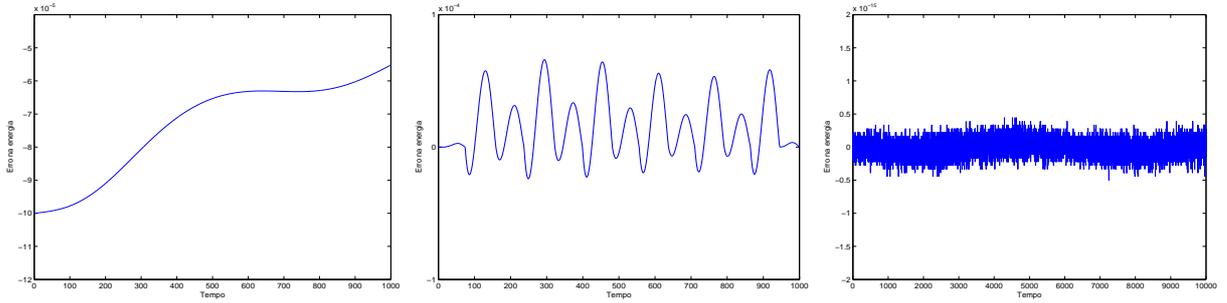


Figura 1.1: Erro na energia no problema de Kepler com o método de Euler explícito, com o método Runge-Kutta de ordem 4 e com o método Störmer-Verlet, respectivamente; as condições iniciais são $\mathbf{q} = (1, 0)^T$ e $\mathbf{p} = (0, 1)^T$, com passo $h = 10^{-3}$

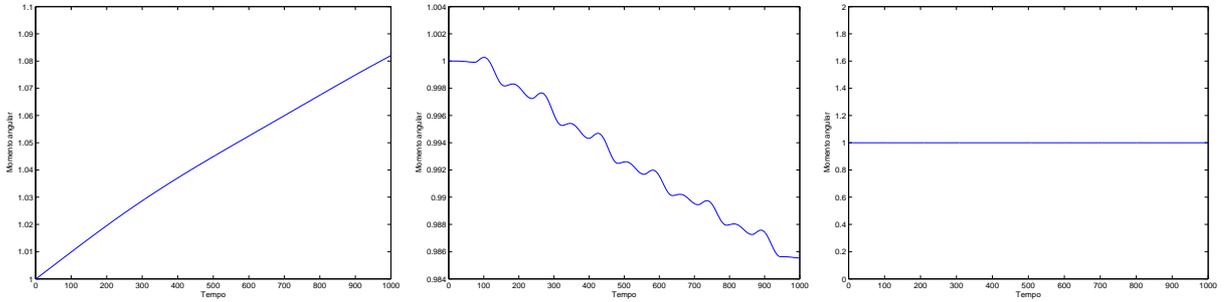


Figura 1.2: Erro no momento angular no problema de Kepler com o método de Euler explícito, com o método Runge-Kutta de ordem 4 e com o método Störmer-Verlet, respectivamente; as condições iniciais são $\mathbf{q} = (1, 0)^T$ e $\mathbf{p} = (0, 1)^T$, com passo $h = 10^{-3}$

Um invariante do sistema é dado por

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

já que

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

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

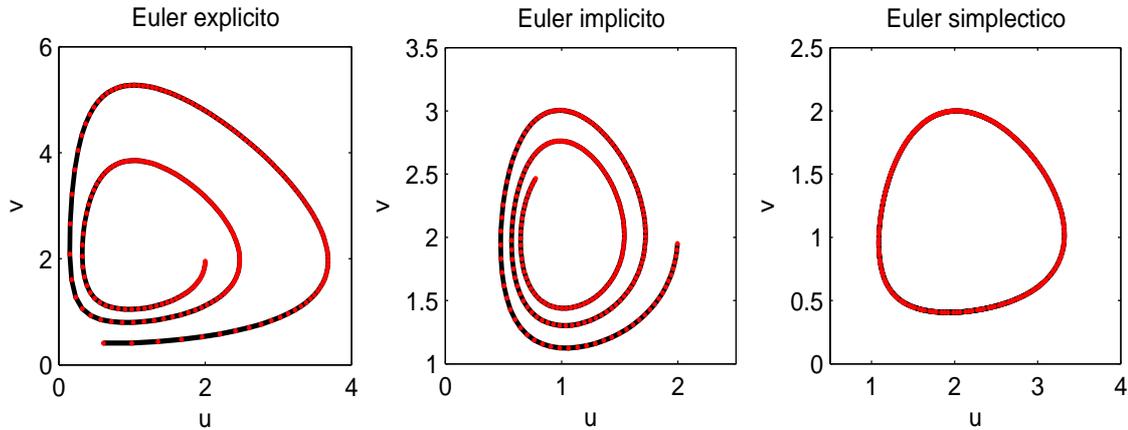


Figura 1.3: Solução das equações (1.5) para os métodos de Euler explícito, implícito e simpléctico, com condição inicial $(u, v) = (2, 2)$ e $h = 0.1$

1.3 Quais as características qualitativas a preservar?

Nesta secção resumiam-se as características globais e qualitativas do sistema descrito pela equação diferencial que se pretendem preservar quando se opta pela utilização de integradores geométricos. É, naturalmente, impossível elaborar uma lista exaustiva, mas a lista parcial que se segue cobre uma vasta variedade de possibilidades [6, 20, 30].

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

- *Simetrias galileanas.* Incluem translações, reflexões e rotações. Por exemplo, no estudo do movimento de um corpo rígido no espaço tridimensional é determinante o facto de tais sistemas serem invariantes sob simetrias galileanas. As simetrias galileanas reduzem a complexidade do retrato da fase e, por isso, devem ser preservadas.
- *Simetrias reversíveis.* Muitos sistemas físicos são invariantes sob simetrias ρ que satisfazem a identidade $\rho^2 = Id$; por exemplo, o sistema solar é invariante sob uma simetria temporal. Um outro exemplo clássico é o dos sistemas hamiltonianos, que são uma função par da quantidade de movimento \mathbf{p} , ou seja, a Hamiltoniana $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ é invariante sob a reflexão simétrica $\mathbf{p} \mapsto -\mathbf{p}$; então, se $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ é uma solução, também $(\mathbf{q}(-t), -\mathbf{p}(-t))$ o é. Consequentemente, é desejável que, nestes casos, também os integradores numéricos exibam uma simetria reversível.

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

Conhecendo um método numérico Φ_h e o seu adjunto Φ_h^* , é possível construir um método simétrico $\hat{\Phi}_h$, pela composição $\hat{\Phi}_h = \Phi_{\frac{h}{2}}^* \circ \Phi_{\frac{h}{2}}$ [13, 20].

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

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

Considere-se o sistema de equações diferenciais ordinárias

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

Este sistema é invariante sob a acção da transformação

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

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

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

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

- *Simetrias do grupo de Lie.* Envolve a invariância do sistema a um grupo de transformações, chamado grupo de Lie. Um exemplo natural em mecânica é a invariância do sistema sob a acção do grupo $SO(3)$.
4. *Comportamentos assintóticos.* Quando se pretende estudar a dinâmica de um sistema, para o fazer numericamente será necessário aplicar um método por um número indefinido de passos, com vista a ganhar percepção sobre o comportamento do sistema no longo prazo. Note-se que em certos contextos, nomeadamente em dinâmica molecular, onde se trabalha com escalas temporais diversas, o estudo no longo prazo (medido em termos da escala temporal menor) é inevitável. Ora, o que ocorre com muitos métodos convencionais é que eles acumulam erros de forma exponencial à medida que o tempo avança; desta forma, o estudo de determinado fenómeno físico no longo prazo não é possível, mesmo para métodos de ordem significativa e com um erro local muito pequeno. É, então, essencial o uso de métodos para os quais se tenha algum controlo sobre o crescimento do erro, mesmo que o erro local desses métodos possa parecer grande quando comparado com outros métodos. Em suma,

espera-se que os integradores tenham um desempenho no longo prazo que permita reproduzir o comportamento assintótico de um determinado sistema dinâmico.

5. *Ordem das soluções.* A equação diferencial pode ter algum princípio que leve à preservação da ordem das soluções. Por exemplo, dados dois conjuntos iniciais de dados $u_0(x)$ e $v_0(x)$ para uma equação diferencial parcial, as soluções podem respeitar a ordem seguinte: se $u_0(x) < v_0(x)$ para todo o x , então $u(x, t) < v(x, t)$ para todo o x e t . A equação do calor $u_t = u_{xx}$, assim como muitas outras equações parabólicas, tem esta propriedade. Será, então, razoável esperar que o integrador numérico obedeça ao mesmo princípio de preservação da ordem das soluções.
6. *Comportamento dinâmico dos integradores.* Os integradores devem preservar, o mais possível, o retrato da fase.

- *Preservação dos pontos de equilíbrio.* Todos os métodos B-séries retêm os pontos de equilíbrio de $\dot{x} = f(x)$ exactamente. Por exemplo, os métodos Runge-Kutta podem ser expandidos em séries de Taylor da forma

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

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

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

para qualquer passo temporal h . Os métodos não geométricos, tipicamente, não preservam, neste sentido, o retrato da fase.

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

Capítulo 2

Sistemas hamiltonianos e lagrangianos

Os sistemas mecânicos resultantes dos princípios físicos são hamiltonianos ou conservativos. Mesmo sistemas dissipativos, tipicamente, mantêm certas leis de conservação (por exemplo, a conservação da massa em dinâmica de fluídos); e, se a dissipação for fraca, tal como a dissipação de Rayleigh, os sistemas são considerados primariamente conservativos, podendo ser integrados em duas partes - a parte dominante, a conservativa, e a parte dissipativa. Tal significa que os sistemas hamiltonianos são frequentes e relevantes numa grande variedade de problemas físicos, em áreas tão diversas como a mecânica, a astronomia, a dinâmica molecular e a óptica e, por isso, foi com naturalidade que a primeira área onde as ideias geométricas foram usadas foi a integração de equações diferenciais ordinárias em problemas hamiltonianos. O ponto de vista hamiltoniano permite estudar com profundidade uma série de problemas da mecânica que não admitem outros meios de solução - por exemplo, o problema da atracção por dois centros imóveis e o problema das geodésicas no elipsóide de três eixos [1]. A perspectiva hamiltoniana assume, ainda, maior importância para os métodos aproximados da teoria das perturbações (na mecânica celeste), para a compreensão do carácter geral do movimento em sistemas mecânicos complexos (teoria ergódica, mecânica estatística) e em relação a outras áreas, tal como a mecânica quântica.

O ponto de vista lagrangiano permite estudar até ao fim uma série de problemas importantes na mecânica, nomeadamente, problemas na teoria das pequenas oscilações e

na dinâmica do sólido. É possível fazer a ponte entre as duas perspectivas, sendo que, em muitos casos, elas são equivalentes [1]. No formalismo lagrangiano obtêm-se, para a evolução do sistema, equações diferenciais ordinárias de segunda ordem ao passo que no formalismo hamiltoniano se obtêm-se equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Neste sentido, o formalismo hamiltoniano é mais apto para aplicar à teoria dos sistemas dinâmicos.

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

Seja Q o espaço das configurações, com coordenadas $q^i, i = 1, \dots, d$, o qual descreve a configuração do sistema, onde d representa o número de graus de liberdade. A Lagrangiana $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ é, em geral, igual à diferença entre a energia cinética T e a energia potencial V do sistema, assumindo-se que $\dot{q}^i = dq^i/dt$ representa a velocidade. L é uma função $L : TQ \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, onde TQ , designado por fibrado tangente de Q , tem coordenadas $(q^1, \dots, q^n, \dot{q}^1, \dots, \dot{q}^n)$. Segundo o princípio variacional de Hamilton, as trajectórias do sistema no intervalo de tempo $[a, b]$ satisfazem

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

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

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

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

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

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

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

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

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

sistema de d equações de segunda ordem, cuja solução depende de $2d$ constantes arbitrárias que descrevem o movimento, dadas as condições iniciais. No caso do pêndulo (1.4), usando o ângulo α como coordenada, a energia cinética é dada por $T = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{ml^2\dot{\alpha}^2}{2}$ e a energia potencial por $V = mgy = -mgl \cos \alpha$. As equações de Euler-Lagrange são $-mgl \sin \alpha - ml^2\ddot{\alpha} = 0$.

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

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

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

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

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

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

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}},$$

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}, \\ \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \end{aligned} \tag{2.5}$$

ou então, em componentes do campo vectorial hamiltoniano X_H

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

O grau de suavidade da Hamiltoniana H pode variar de problema para problema, mas assume-se que, no mínimo, H é de classe C^2 , de forma a permitir que o lado direito do sistema (2.5) seja de classe C^1 , e então, os teoremas da existência e unicidade sejam aplicáveis.

Por vezes, é útil combinar todas as variáveis dependentes em (2.5) num vector $2d$ -dimensional $\mathbf{y} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$. Neste caso, (2.5) assume a forma

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = J^{-1} \nabla H, \tag{2.6}$$

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

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

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

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I_d \\ -I_d & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.7}$$

e I_d representa a matriz identidade de dimensão d .

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

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

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

obtém-se

$$\begin{aligned}
 H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \mathbf{p}^T \dot{\mathbf{q}} - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \|\dot{\mathbf{q}}_i\|^2 + V(\mathbf{q}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \|\mathbf{p}^i\|^2 + V(\mathbf{q}).
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\{\dot{F}\} = \{F, H\} \quad (2.9)$$

para todas as funções $F \in \mathcal{F}(P)$, onde $\mathcal{F}(P)$ representa o espaço das funções suaves no espaço de fases $P = \mathbb{R}^{6N}$ [31]. Os colchetes de Poisson são definidos como

$$\{G, K\} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial G}{\partial \mathbf{q}^i} \frac{\partial K}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}_i} \frac{\partial K}{\partial \mathbf{q}^i} \right), \quad (2.10)$$

para todas as funções $G, K \in \mathcal{F}(P)$. Usando as equações (2.5) e (2.10), para qualquer $F \in \mathcal{F}(P)$, obtém-se

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial F}{\partial \mathbf{q}^i} \dot{\mathbf{q}}^i + \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}_i} \dot{\mathbf{p}}_i \right) &= \frac{dF}{dt} \\ &= \{F, H\} \\ &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial F}{\partial \mathbf{q}^i} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}^i} \right), \end{aligned} \quad (2.11)$$

a qual é equivalente às equações (2.5), já que $F \in \mathcal{F}(P)$ é arbitrária.

Demonstra-se que as equações de Euler-Lagrange são equivalentes às equações de Hamilton. Os princípios variacionais também existem no formalismo hamiltoniano [1, 13, 26]. Para derivar as equações de Euler-Lagrange, consideram-se curvas q no espaço das configurações, ao passo que no caso das equações de Hamilton consideram-se curvas no espaço (q, p) , o espaço de fase. O princípio de Hamilton no espaço de fase é traduzido no teorema seguinte.

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

$$\delta \int_a^b [p_i \dot{q}^i - H(q^i, p_i)] dt = 0, \quad (2.12)$$

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

Note-se que

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

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

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

o qual se anula para todas as $\delta p_i, \delta q^i$, satisfazendo as equações de Hamilton (2.5).

2.2 Leis de conservação

2.2.1 Lei de conservação da energia

Os sistemas hamiltonianos que não dependem explicitamente do tempo têm natureza conservativa, no sentido da conservação da energia do sistema. No caso de T ser quadrática, verifica-se a igualdade [1, 13, 26]

$$H = T + V,$$

ou seja, a Hamiltoniana representa a energia total do sistema, sendo um primeiro integral do sistema. Este resultado é evidente nas equações (2.8), onde a Hamiltoniana coincide com a energia total do sistema, expresso nas variáveis (\mathbf{q}, \mathbf{p}) .

O mesmo resultado é obtido pelo uso dos colchetes de Poisson; por um lado, note-se que se verifica $\{F, G\} = -\{G, F\}$ e, em particular, $\{H, H\} = 0$, e por outro lado, usando a equação (2.10), obtém-se

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

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

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

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

As simetrias têm um papel relevante nos problemas da mecânica. Qualquer simetria do problema que permita adotar um sistema de coordenadas \mathbf{q} , de modo a fazer com que

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

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

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

dependente do parâmetro $c = p_1$.

2.2.2 Teorema de Noether

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

Uma dedução possível do teorema de Noether é a que se encontra em [15]. Seja s o parâmetro que caracteriza uma transformação geral de coordenadas; se $s = 0$, as coordenadas não são transformadas. Por exemplo, considere-se uma Lagrangiana que contém uma força central arbitrária; então, o sistema de coordenadas pode rodar livremente sem alterar a Lagrangiana (admite-se que a rotação é independente do tempo). Para qualquer valor de θ , o ponto (x, y) é transformado num ponto (x', y') , de acordo com

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

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

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

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

Se a Lagrangiana é invariante, então L' não depende de s (por simplicidade, não se considera a dependência temporal):

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

De acordo com a regra da cadeia, vem

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

e de acordo com as equações de Euler-Lagrange:

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

Então,

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

o que significa que

$$I(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \equiv p \frac{d\mathbf{Q}}{ds} \Big|_{s=0} = \text{const}, \quad (2.13)$$

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

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

$$I_j(q^1, q^2, \dots, q^N, \dot{q}^1, \dot{q}^2, \dots, \dot{q}^N) \equiv \sum_{k=1}^N p_k \frac{dQ^k}{ds_j} \Big|_{\text{todos } s=0} = \text{const}, \quad (2.14)$$

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

A expressão (2.14) traduz o teorema de Noether: se a Lagrangiana é invariante sob uma simetria contínua, existem quantidades conservadas associadas a essa simetria, uma para cada parâmetro da transformação. Tal pode ser determinado diferenciando cada coordenada em ordem aos parâmetros da transformação, na vizinhança da transformação identidade, multiplicando pela quantidade de movimento conjugada e somando ao longo dos graus de liberdade. O teorema de Noether irá ser retomado na secção sobre funções quantidade de movimento.

2.2.3 Simplecticidade

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

Os sistemas hamiltonianos preservam a simplecticidade do seu fluxo. O que é que isso significa? A solução do sistema (2.6) induz uma transformação ψ no espaço de fases \mathbb{R}^{2d} ; tal função diz-se simpléctica se, sendo ψ linear,

$$\psi^T J \psi = J, \quad (2.15)$$

onde a matriz J é dada pela expressão (2.7). A interpretação geométrica da simplecticidade do fluxo hamiltoniano é fornecida, por exemplo, em [1, 13]. Os objectos básicos a serem estudados são paralelogramos de duas dimensões em \mathbb{R}^{2d} . Admita-se que os paralelogramos podem ser gerados por dois vectores

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

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

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

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

$$\text{área.or}(P) = \det \begin{pmatrix} \xi^p & \eta^p \\ \xi^q & \eta^q \end{pmatrix} = \xi^p \eta^q - \xi^q \eta^p. \quad (2.16)$$

No caso $d > 1$, substitui-se (2.16) pela soma das áreas orientadas das projecções de P nos planos coordenados (p_i, q^i)

$$\omega(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \sum_{i=1}^d \det \begin{pmatrix} \boldsymbol{\xi}_i^p & \boldsymbol{\eta}_i^p \\ \boldsymbol{\xi}_i^q & \boldsymbol{\eta}_i^q \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^d (\boldsymbol{\xi}_i^p \boldsymbol{\eta}_i^q - \boldsymbol{\xi}_i^q \boldsymbol{\eta}_i^p), \quad (2.17)$$

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

$$\omega(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \boldsymbol{\xi}^T J \boldsymbol{\eta}. \quad (2.18)$$

A definição de simplecticidade em (2.15) é equivalente a

$$\omega(A\boldsymbol{\xi}, A\boldsymbol{\eta}) = \omega(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}), \quad (2.19)$$

para todo o $\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{2d}$, sendo $A : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ uma função linear. Mostra-se que $\det A = 1$ [26].

No caso $d = 1$, a expressão $\omega(\xi, \eta)$ representa a área do paralelogramo P , e então a simplecticidade da função linear A equivale à preservação da área de P . No caso geral, onde $d > 1$, a simplecticidade significa que a soma das áreas orientadas das projecções de P sobre (p_i, q^i) é a mesma, no caso dos paralelogramos transformados $A(P)$.

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

$$\psi'(p, q)^T J \psi'(p, q) = J \quad \text{ou} \quad \omega(\psi'(p, q)\boldsymbol{\xi}, \psi'(p, q)\boldsymbol{\eta}) = \omega(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}). \quad (2.20)$$

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

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

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

$$\Omega(M) = \iint_K \omega \left(\frac{\partial \phi}{\partial s}(s, t), \frac{\partial \phi}{\partial t}(s, t) \right) ds dt. \quad (2.21)$$

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

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

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

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

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

$$\begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varpi t & -(m\varpi) \sin \varpi t \\ (m\varpi)^{-1} \sin \varpi t & \cos \varpi t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(0) \\ q(0) \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

No caso de $m\varpi = 1$, o fluxo traduz-se numa rotação rígida de ϖt radianos. No caso de $m\varpi \neq 1$, mostra-se que a matriz representativa do fluxo em (2.22) pode ser factorizada como [34]

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

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

O conjunto das transformações simplécticas $\psi : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ é um grupo, já que se verificam cumulativamente as seguintes condições:

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

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

2. A composição de transformações simplécticas é associativa.
3. Se ψ é simpléctica, então a sua inversa ψ^{-1} também o é.

Partindo da hipótese de que a transformação é simpléctica, usando uma definição

alternativa, baseada na identidade $J^{-1} = -J$, tem-se

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

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

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

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

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

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

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

A demonstração deste teorema pode ser encontrada em [13]. Demonstra-se, também, a equivalência entre fluxos simplécticos e a sua natureza hamiltoniana. Uma equação diferencial diz-se localmente hamiltoniana se a igualdade (2.6) se verificar.

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

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

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

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

[1] demonstra uma afirmação um pouco mais geral, também devida a Liouville. Considere-se um sistema de equações diferenciais ordinárias $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, onde $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$,

cuja solução se prolonga por todo o eixo do tempo. Seja g^t o respectivo grupo de transformações

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

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

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

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

O teorema de Liouville é apresentado noutra forma em [15]. Defina-se a densidade do espaço de fase como

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

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

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

ou seja, a área de qualquer distribuição no espaço de fases é preservada. O volume do espaço de fases é conservado, isto é, a densidade do espaço de fases assemelha-se a um fluído incompressível.

No seguimento do teorema de Liouville faz sentido enunciar o teorema de Poincaré, citado e demonstrado em [1].

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

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

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

paradoxal, porque o «certo tempo» é maior que o tempo de existência do sistema solar.

Quando se considera $d = 1$, fluxo simpléctico significa preservação da área; [34] enfatiza que, para $d > 1$, a generalização correcta é a simplecticidade e não a preservação do volume. A simplecticidade caracteriza o fluxo hamiltoniano, ao passo que a conservação do volume é uma propriedade mais fraca, partilhada por alguns sistemas não hamiltonianos. Note-se de seguida, por exemplo, como a simplecticidade caracteriza e distingue os sistemas hamiltonianos dos sistemas genéricos.

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

Considere-se um sistema autónomo (H não depende, explicitamente, do tempo) de equações diferenciais no plano, da forma

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

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

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

Regra geral, a situação de λ_1, λ_2 serem imaginários puros conjugados não se verifica: neste caso, pequenas perturbações arbitrárias no lado direito do sistema transformam-no num sistema com pontos de equilíbrio com natureza de atractor ou repulsor. No entanto, restringindo esta consideração a sistemas autónomos hamiltonianos no plano, o que é

regra geral - pontos de equilíbrio hiperbólicos - não se pode verificar; atractores (ou repulsores) não têm lugar porque o fluxo, na sua vizinhança, contrai-se (expande-se). Um atractor para um fluxo ψ é um conjunto compacto A , com uma vizinhança U , tal que $\psi_t(U) \subset U$, $\forall t > 0$ e $A = \bigcap_{t>0} \psi_t(U)$. Mostra-se que, devido à symplecticidade do fluxo hamiltoniano, não existem atractores não triviais (o conjunto vazio e todo o espaço) [25]. Em suma, o caso de λ_1, λ_2 terem parte real nula é, agora, genérico: se um sistema hamiltoniano se enquadrar nesta situação (o ponto de equilíbrio é um centro), então, tipicamente, sistemas hamiltonianos vizinhos também o são.

Considerações análogas podem ser feitas a propósito das soluções periódicas. Em sistemas autónomos de equações diferenciais no plano, as órbitas periódicas são ciclos-limite estáveis ou instáveis. Na vizinhança de tais ciclos limite, a área contrai-se ou expande-se, o que significa que os ciclos limite não têm lugar em sistemas hamiltonianos. Para sistemas autónomos hamiltonianos no plano, uma órbita periódica está rodeada por outras órbitas periódicas, uma situação que não é genérica em sistemas autónomos não hamiltonianos. [34] menciona que todas as propriedades específicas da dinâmica hamiltoniana podem ser derivadas da propriedade da preservação da área, ou seja, da symplecticidade do fluxo. Com efeito, a conservação pelo fluxo da área orientada é uma característica que só é verificável em sistemas hamiltonianos. Assuma-se que Ω é simplesmente conexo e que

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t), \quad \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{g}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t), \quad (2.23)$$

é um sistema diferencial suave cujo fluxo é simpléctico. Então, (2.23) é, efectivamente, um sistema hamiltoniano, para um determinado H . Pelo teorema de Liouville, para cada t , o campo vectorial $(\mathbf{f}, \mathbf{g})^T$ tem divergência nula, e então

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

condição necessária e suficiente para que $(\mathbf{g}, -\mathbf{f})^T$ seja o gradiente da função escalar H , ou seja, para que (2.23) seja hamiltoniano.

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

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

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

2.3 Sistemas forçados e com restrições

Muitos sistemas mecânicos são restringidos por vínculos holónomos. Por exemplo, seja γ uma curva suave no plano. Quando, nas vizinhanças de γ há um campo de forças muito intenso orientado no sentido da curva, o ponto em movimento mantém-se nas proximidades de γ . No limite, considerando um campo de forças infinitamente intenso, o ponto é obrigado a manter-se na curva γ . Um exemplo de sistemas com restrições é dado pelo caso de uma partícula cujo movimento é restrito a uma esfera.

No caso de sistemas mecânicos com restrições ou constrangimentos, aplica-se, não o princípio de Hamilton, mas o princípio de Lagrange-d'Alembert. Imagine-se uma partícula de massa m que se move numa superfície, definida por $g(\mathbf{q}) = 0$, para alguma função g suave. Em qualquer instante, a partícula sofre a acção de dois tipos de forças: as forças aplicadas, definidas pelo potencial V , e as forças da restrição, que actuam de forma a manter a partícula na superfície. Embora, em geral, não se saiba qual a direcção dessa força, assume-se o princípio de Lagrange-d'Alembert, ou seja, a força da restrição actua na direcção normal à superfície na qual o movimento da partícula está restrito (na direcção do gradiente da função g , no ponto de contacto). Se as forças da restrição forem representadas por \mathbf{F}_g , tem-se que $\mathbf{F} \parallel \frac{\partial g(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}}$, ou $\mathbf{F} = \lambda \frac{\partial g(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}}$. Usando a segunda lei de Newton, as equações do movimento assumem a forma

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{q} &= \mathbf{v}, \\ \mathbf{M} \frac{d}{dt} \mathbf{v} &= -\frac{\partial V(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} - \sum_{i=1}^m \frac{\partial g_i(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \lambda_i, \\ g_i(\mathbf{q}) &= 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \end{aligned} \tag{2.24}$$

onde \mathbf{M} representa uma matriz de massa, definida positiva, simétrica e, tipicamente, diagonal. Estas equações podem ser escritas de uma forma mais compacta, através da introdução de $\mathbf{g}(\mathbf{q}) = (g_1(\mathbf{q}), \dots, g_m(\mathbf{q}))^T$; se a sua matriz jacobiana for representada por

$\mathbf{G}(\mathbf{q})^T = \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}}$, e $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T$, as equações (2.24) vêm

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{q} &= \mathbf{v}, \\ \mathbf{M} \frac{d}{dt} \mathbf{v} &= -\frac{\partial V(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} - \mathbf{G}(\mathbf{q})^T \boldsymbol{\lambda}, \\ \mathbf{g}(\mathbf{q}) &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

As equações (2.25) são um caso particular das equações de Euler-Lagrange com restrições. Um exemplo clássico é o do pêndulo esférico, onde uma massa m está suspensa num fio rígido de massa desprezível, com comprimento $L > 0$. Em coordenadas cartesianas, a energia é dada por

$$E = \frac{1}{2m}(x^2 + y^2 + z^2) + mgz,$$

e as equações do movimento são

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= 2\lambda x \\ m\ddot{y} &= 2\lambda y \\ m\ddot{z} &= 2\lambda z - mg \\ 0 &= x^2 + y^2 + z^2 - L^2. \end{aligned}$$

As equações de Euler-Lagrange podem ser generalizadas para descrever sistemas mecânicos com forças externas. Um caso particular é quando essas forças são dissipativas.

Seja E a energia do sistema. Um campo vectorial vertical Y em TQ diz-se fracamente dissipativo se

$$\langle dE, Y \rangle \leq 0,$$

para todos os pontos de TQ . Se

$$\langle dE, Y \rangle < 0$$

o campo vectorial diz-se dissipativo. Um sistema lagrangiano dissipativo em TQ é um campo vectorial $Z + Y$, sendo Z o campo vectorial lagrangiano e Y o campo vectorial dissipativo. Um caso particular de forças dissipativas é a função dissipação de Rayleigh R .

Se o campo de forças for dado por uma função dissipativa de Rayleigh R , as equações de Euler-Lagrange forçadas têm a forma

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q^i} = -\frac{\partial R}{\partial \dot{q}^i}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}). \quad (2.26)$$

No caso da Lagrangiana com a forma

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

onde $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^d$, M uma matriz de massa, constante, simétrica e definida positiva, e V um dado potencial, as equações do movimento assumem a forma

$$M \ddot{\mathbf{q}} = -\nabla V(\mathbf{q}) - \frac{\partial R}{\partial \dot{\mathbf{q}}}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}).$$

Seja a energia dada por

$$E(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}^T M \dot{\mathbf{q}} + V(\mathbf{q})$$

e

$$\frac{d}{dt} E = - \left\langle \dot{\mathbf{q}}, \frac{\partial R}{\partial \dot{\mathbf{q}}}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \right\rangle.$$

No caso clássico em que

$$R(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}^T S \dot{\mathbf{q}},$$

onde S é uma matriz simétrica definida positiva, vem

$$\frac{d}{dt} E = -\dot{\mathbf{q}}^T S \dot{\mathbf{q}} \leq 0,$$

ou seja, a dissipação do tipo Rayleigh é fraca.

No caso geral, [26] demonstra qual a forma genérica das equações de Euler-Lagrange forçadas. Seja o campo de forças dado por

$$F^Y = \left(q^i, \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j} Y^j(q^k, \dot{q}^k) \right).$$

As equações de Euler-Lagrange forçadas são

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q^i} = F_i^Y(q^k, \dot{q}^k). \quad (2.27)$$

No caso de sistemas com restrições, as equações de Euler-Lagrange são análogas, se o termo relativo à restrição for perspectivado como a força da restrição. Na derivação dessas equações é necessário apelar ao teorema dos multiplicadores de Lagrange, para espaços lineares e para variedades, ambos demonstrados em [26].

Sejam V e Λ espaços de Banach e $\varphi : V \rightarrow \Lambda$ uma função suave. Admita-se que 0 é um

valor regular de φ , tal que $C = \varphi^{-1}(0)$ é uma subvariedade. Seja $h : V \rightarrow \mathbb{R}$ uma função suave e defina-se $\bar{h} : V \times \Lambda^* \rightarrow \mathbb{R}$ por

$$\bar{h}(x, \lambda) = h(x) - \langle \lambda, \varphi(x) \rangle.$$

Teorema 2.8 (Teorema dos multiplicadores de Lagrange para espaços lineares). *As condições seguintes são equivalentes em $x_0 \in C$:*

- (i) x_0 é um ponto crítico de $h|_C$;
- (ii) existe um $\lambda_0 \in \Lambda^*$ tal que (x_0, λ_0) é um ponto crítico de \bar{h} .

O teorema seguinte é uma generalização do teorema dos multiplicadores de Lagrange ao caso das variedades. Seja M uma variedade e $N \subset M$ uma subvariedade. Admita-se que $\pi : E \rightarrow M$ é um fibrado vectorial sobre M e φ uma secção de E que é transversa ao fibrado. Assuma-se que $N = \varphi^{-1}(0)$.

Teorema 2.9 (Teorema dos multiplicadores de Lagrange para variedades). *As condições seguintes são equivalentes em $x_0 \in N$ e $h : M \rightarrow \mathbb{R}$ uma função suave:*

- (i) x_0 é um ponto crítico de $h|_N$;
- (ii) existe uma secção λ_0 do fibrado dual E^* tal que $\lambda_0(x_0)$ é um ponto crítico de $\bar{h}(\lambda_x) = E^* \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$\bar{h}(\lambda_x) = h(x) - \langle \lambda_x, \varphi(x) \rangle,$$

onde λ_x representa um elemento arbitrário de E_x^* .

As restrições impostas a um sistema mecânico podem ser de dois tipos: holónomas e não holónomas. As restrições holónomas são impostas no espaço das configurações, tal como a incompressibilidade na mecânica dos fluídos. As não holónomas envolvem condições na velocidade.

Seja $N \subset Q$ um subconjunto de uma dada variedade Q . Como $TN \subset Q$, a Lagrangiana $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$ pode ser restringida a TN , isto é, $L_N : TN \subset TQ \rightarrow \mathbb{R}$. Admita-se que $N = \varphi^{-1}(0)$ para uma secção $\varphi : Q \rightarrow E^*$, o dual de um fibrado vectorial E sobre Q . Aplicando os princípios variacionais a L_N , obtém-se

$$\delta \int L_N(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) dt = 0, \tag{2.28}$$

onde a variação é feita sobre curvas com pontos extremos fixos e sujeita à restrição $\varphi(\mathbf{q}(t)) = 0$. Aplicando o teorema dos multiplicadores de Lagrange à equação (2.28), resulta

$$\delta \int [L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) - \langle \lambda(\mathbf{q}(t), t), \varphi(\mathbf{q}(t)) \rangle] dt = 0 \quad (2.29)$$

para alguma função $\lambda(\mathbf{q}, t)$ com valores no fibrado E e onde a variação é sobre curvas \mathbf{q} em Q e curvas λ em E . Em coordenadas, a equação (2.29) escreve-se como

$$\delta \int [L(q^i, \dot{q}^i) - \lambda^a(q^i, t) \varphi_a(q^i)] dt = 0.$$

As equações de Euler-Lagrange forçadas correspondentes, nas variáveis q^i, λ^a , são

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial L}{\partial q^i} - \lambda^a \frac{\partial \varphi_a}{\partial q^i}, \quad (2.30)$$

com

$$\varphi_a = 0. \quad (2.31)$$

O termo $-\lambda^a \frac{\partial \varphi_a}{\partial q^i}$ é a força da restrição, e neste sentido, as equações (2.30) e (2.31) são análogas às equações (2.27).

Capítulo 3

Métodos numéricos

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

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

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

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

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

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

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

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

Considere-se um integrador arbitrário

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

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

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

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

3.1 Métodos de Euler: explícito, implícito e simpléctico

3.1.1 O método θ : métodos de Euler explícito e implícito

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

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

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

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

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

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

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

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

designada por fluxo numérico ou discreto.

O método de Euler (3.4) é convergente e de ordem 1 [16].

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

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

A regra trapezoidal, baseada nesta expressão, é

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

A regra trapezoidal (3.5) é convergente e de ordem 2 [16]. Outra diferença entre o método de Euler e a regra trapezoidal reside na natureza explícita do primeiro e na natureza implícita da segunda; neste último caso, será necessário resolver um sistema de equações não linear. O facto de o método ser implícito e, por isso, ter o custo associado da resolução de um sistema de equações não lineares, não significa, necessariamente, que será preferível o uso de métodos explícitos; tal é apenas um dos atributos de um método numérico, entre outras características relevantes.

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

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

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

qualquer escolha do passo temporal [2, 30].

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

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

Se $\theta = 0$ e $\theta = \frac{1}{2}$, recuperam-se os métodos de Euler explícito e a regra trapezoidal, respectivamente. A expressão (3.7) origina um integrador de ordem 2 se $\theta = \frac{1}{2}$ e, caso contrário, de ordem 1, sendo um método convergente para todo o $\theta \in [0, 1]$. O método é explícito para $\theta = 0$ e, caso contrário, é implícito. Uma questão pertinente, a propósito deste método é, qual o seu interesse, além dos casos já citados - para $\theta = 0$, que origina um método explícito (método de Euler explícito) e $\theta = \frac{1}{2}$, que origina um método de ordem 2 (regra trapezoidal)? [16] menciona 3 razões. Em primeiro lugar, o conceito de ordem baseia-se no facto de o erro estar concentrado, principalmente, no primeiro termo da série de Taylor que foi desprezado; tal é verdade, à medida que $h \rightarrow 0$ mas, na realidade, no computador tal não é possível. Assim, em certas circunstâncias, se for desejável anular termos da expansão de Taylor que estão inseridos no erro, tal é possível pela escolha de θ ; por exemplo, para $\theta = 2/3$ os termos $O(h^3)$ desaparecem, retendo-se o termo $O(h^2)$. Em segundo lugar, este método é um método geral, baseado, não na mera intuição geométrica, mas numa aproximação mais formal (na expansão de Taylor e no teorema da função implícita). A terceira razão apontada é a escolha $\theta = 1$, com grande relevância em termos práticos. Para esta escolha particular, obtém-se

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

conhecido por método de Euler implícito.

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

3.1.2 O método de Euler simplético

Para sistemas do tipo

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

usa-se o método de Euler particionado ou simplético

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

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

3.1.3 O método de Euler simplético em sistemas com restrições

Considere-se um sistema mecânico com posições (q^1, \dots, q^d) , com o movimento restrito de forma a satisfazer $g(\mathbf{q}) = 0$, onde $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^m$, com $m < d$.

Admita-se que se integra a variável \mathbf{p} pelo método de Euler implícito e a variável \mathbf{q} pelo método de Euler explícito. Obtém-se

$$\begin{aligned}\hat{p}_{n+1} &= p_n - h \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(\hat{p}_{n+1}, q^n) + G(q^n)^T \lambda_{n+1} \right) \\ q^{n+1} &= q^n + h \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\hat{p}_{n+1}, q^n) \\ 0 &= g(q^{n+1}),\end{aligned}\tag{3.11}$$

onde $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T$ representam os multiplicadores de Lagrange, e $G(\mathbf{q}) = \frac{\partial g}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q})$. A aproximação numérica (\hat{p}_{n+1}, q^{n+1}) satisfaz $g(\mathbf{q}) = 0$, mas não $G(\mathbf{q}) \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = 0$. Então, para obter a aproximação $(p_{n+1}, q^{n+1}) \in M$, com

$$M = \{(\mathbf{p}, \mathbf{q}) : g(\mathbf{q}) = 0, G(\mathbf{q}) \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = 0\},\tag{3.12}$$

adiciona-se a projecção

$$\begin{aligned}p_{n+1} &= \hat{p}_{n+1} - hG(q^{n+1})^T \mu_{n+1} \\ 0 &= G(q^{n+1}) \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(p_{n+1}, q^{n+1}).\end{aligned}\tag{3.13}$$

As equações (3.13) constituem um sistema não linear em p_{n+1} e $h\mu_{n+1}$.

3.2 Métodos Runge-Kutta: explícitos, implícitos e particionados

3.2.1 Métodos Runge-Kutta explícitos

A forma integral do sistema (3.1) é dada por

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

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

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

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

$$\int_a^b f(\tau) \gamma(\tau) d\tau \approx \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j), \quad (3.14)$$

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

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

onde a constante $c > 0$ é independente de f [16]. Neste caso, a quadratura diz-se de ordem p .

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}_1 &= \mathbf{y}_n \\ \boldsymbol{\xi}_2 &= \mathbf{y}_n + h a_{2,1} \mathbf{f}(t_n, \boldsymbol{\xi}_1) \\ \boldsymbol{\xi}_3 &= \mathbf{y}_n + h a_{3,1} \mathbf{f}(t_n, \boldsymbol{\xi}_1) + h a_{3,2} \mathbf{f}(t_n + c_2 h, \boldsymbol{\xi}_2) \\ &\vdots \\ \boldsymbol{\xi}_\nu &= \mathbf{y}_n + h \sum_{i=1}^{\nu-1} a_{\nu,i} \mathbf{f}(t_n + c_i h, \boldsymbol{\xi}_i) \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^{\nu} b_j \mathbf{f}(t_n + c_j h, \boldsymbol{\xi}_j). \end{aligned} \tag{3.15}$$

Diz-se que (3.15) tem ν etapas. A matriz $A = (a_{j,i})_{j,i=1,2,\dots,\nu}$, onde os elementos que não constam são nulos, é a matriz *RK*; as ponderações *RK* e os nodos *RK* são dados, respectivamente, por

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

Esta informação é apresentada numa tabela *RK*

$$\frac{\mathbf{c}}{\mathbf{b}^T} \mid \begin{array}{c} A \\ \hline \end{array}$$

Mas, como escolher a matriz *RK*? Concretizando para $\nu = 2$, [16] mostra que

$$b_1 + b_2 = 1, \quad b_2 c_2 = \frac{1}{2}, \quad a_{2,1} = c_2. \tag{3.16}$$

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

Tabela 3.1: Métodos Runge-Kutta de ordem 2

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

Tabela 3.2: Método Runge-Kutta clássico

As condições (3.16) não definem de forma única um método Runge-Kutta explícito de ordem 2. As escolhas habituais passam por uma das tabelas *RK* que constam da tabela 3.1. As condições para que um método Runge-Kutta explícito seja de terceira ordem são

$$b_1 + b_2 + b_3 = 1, \quad b_2c_2 + b_3c_3 = \frac{1}{2}, \quad b_2c_2^2 + b_3c_3^2 = \frac{1}{3}, \quad b_3a_{3,2}c_2 = \frac{1}{6}. \quad (3.17)$$

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

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

Tabela 3.3: Método de Nyström

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

Tabela 3.4: Método Runge-Kutta de ordem 4

3.2.2 Métodos Runge-Kutta implícitos

Formulação dos métodos Runge-Kutta implícitos

Considere-se o algoritmo mais geral do que (3.15):

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\xi}_j &= \mathbf{y}_n + h \sum_{i=1}^{\nu} a_{j,i} \mathbf{f}(t_n + c_i h, \boldsymbol{\xi}_i), & j = 1, 2, \dots, \nu, \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^{\nu} b_j \mathbf{f}(t_n + c_j h, \boldsymbol{\xi}_j).\end{aligned}\tag{3.18}$$

Neste caso, a matriz RK , $A = (a_{j,i})_{j,i=1,2,\dots,\nu}$, é arbitrária, ao passo que em (3.15) era estritamente triangular inferior. Impõe-se a igualdade

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

para que o método tenha ordem não trivial.

O algoritmo (3.18) é um sistema de νd equações algébricas implícitas, com $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$. Esta desvantagem, relativamente ao método explícito, pode ser compensada por propriedades de estabilidade superiores.

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

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\xi}_1 &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}h \left[\mathbf{f}(t_n, \boldsymbol{\xi}_1) - \mathbf{f}(t_n + \frac{2}{3}h, \boldsymbol{\xi}_2) \right] \\ \boldsymbol{\xi}_2 &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{12}h \left[3\mathbf{f}(t_n, \boldsymbol{\xi}_1) + 5\mathbf{f}(t_n + \frac{2}{3}h, \boldsymbol{\xi}_2) \right] \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}h \left[\mathbf{f}(t_n, \boldsymbol{\xi}_1) + 3\mathbf{f}(t_n + \frac{2}{3}h, \boldsymbol{\xi}_2) \right],\end{aligned}\tag{3.19}$$

cujas tabelas RK é a que consta da tabela 3.5, método de ordem três [16].

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

Tabela 3.5: Método Runge-Kutta implícito de ordem 2

Métodos de colocação

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

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t_n) &= \mathbf{y}_n \\ \mathbf{u}'(t_n + c_j h) &= \mathbf{f}(t_n + c_j h, \mathbf{u}(t_n + c_j h)), \quad j = 1, 2, \dots, \nu. \end{aligned} \tag{3.20}$$

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

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

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

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

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

O método de colocação (3.20) é um método de Runge-Kutta implícito, conforme se desprende do teorema seguinte [16].

Teorema 3.1. *Sejam*

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

e

$$a_{j,i} = \int_0^{c_j} \frac{q_i(\tau)}{q_i(c_i)} d\tau, \quad j, i = 1, 2, \dots, \nu, \quad (3.21)$$

$$b_j = \int_0^1 \frac{q_j(\tau)}{q_j(c_j)} d\tau, \quad j = 1, 2, \dots, \nu. \quad (3.22)$$

O método de colocação (3.20) é idêntico ao método de Runge-Kutta implícito

$$\frac{\mathbf{c} \mid A}{\mid \mathbf{b}^T}$$

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

Se as formulações (3.18) e (3.20) são idênticas, por que e quando usar uma ou outra? Em termos práticos, a formulação (3.18) é a adequada, ao passo que a formulação (3.20) é mais conveniente na análise da ordem do método, fazendo uso do teorema e do corolário que se seguem.

Teorema 3.2. *Admita-se que*

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

para algum $m \in \{0, 1, \dots, \nu\}$. Então, o método de colocação (3.20) é de ordem $\nu + m$.

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

Corolário 3.1. *Sejam c_1, c_2, \dots, c_ν zeros do polinómio $P_\nu \in \mathbb{P}_\nu$, que é ortogonal com a função $\gamma(t) = 1$, $0 \leq t \leq 1$. Então o método de colocação subjacente (3.20) é de ordem 2ν .*

Os métodos de ν -etapas e de ordem 2ν que se enquadram neste corolário designam-se por métodos de Gauss-Legendre. O polinómio P_ν pode ser obtido de forma explícita, obtendo-se

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

Para $\nu = 1$, vem $P_1(t) = t - \frac{1}{2}$, ou seja, $c_1 = \frac{1}{2}$. O método, descrito pela tabela 3.6, é a regra

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

Tabela 3.6: Regra do ponto médio implícita

$$\begin{array}{c|cc} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

Tabela 3.7: Método Runge-Kutta implícito de ordem 4

do ponto médio implícita (3.6). Se $\nu = 2$, resulta $P_2(t) = t^2 - t + \frac{1}{6}$, ou seja, $c_1 = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$ e $c_2 = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$. As fórmulas (3.21) e (3.22) produzem o método de Runge-Kutta implícito de quarta ordem, com duas etapas, que consta da tabela 3.7. Este integrador é um integrador simétrico [13]. O cálculo de sistemas algébricos não lineares originários de métodos de Runge-Kutta implícitos com ν grande é pesado e computacionalmente dispendioso, mas pode ser compensado pelo aumento da ordem do método. O compromisso mais ambicioso entre os custos de implementação e a ordem do método é dado pelo método de Gauss-Legendre com três etapas (tabela 3.8) [16]. Os métodos de Lobatto IIIA, métodos de colocação, são obtidos, com $c_1 = 0$ e $c_s = 1$, de forma a que a ordem do método seja máxima. Para que tal se verifique, os nodos devem ser os zeros de

$$\frac{d^{\nu-2}}{dx^{\nu-2}} (x^{\nu-1}(x-1)^{\nu-1}), \tag{3.23}$$

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

$$\begin{array}{c|ccc} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} & \frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30} \\ \frac{1}{2} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24} & \frac{2}{9} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24} \\ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30} & \frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} \\ \hline & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18} \end{array}$$

Tabela 3.8: Método de Gauss-Legendre de ordem 6

0	0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{24}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{24}$
1	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$

Tabela 3.9: Método Lobatto IIIA de ordem 4

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

Tabela 3.10: Método Lobatto IIIB de ordem 4

Métodos de colocação descontínuos

Os métodos de colocação descontínuos são uma modificação da ideia dos métodos de colocação. Sejam $c_2, \dots, c_{\nu-1}$ números reais distintos (em geral, $0 \leq c_i \leq 1$) e b_1, b_ν dois reais arbitrários. O método de colocação descontínuo é definido por apelar ao polinómio de grau $\nu - 2$ que satisfaz

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}(t_0) &= \mathbf{y}_0 - hb_1(\mathbf{u}'(t_0) - \mathbf{f}(t_0, \mathbf{u}(t_0))) \\
 \mathbf{u}'(t_0 + c_i h) &= \mathbf{f}(t_0 + c_i h, \mathbf{u}(t_0 + c_i h)), \quad i = 2, \dots, \nu - 1 \\
 \mathbf{y}_1 &= \mathbf{u}(t_1) - hb_\nu(\mathbf{u}'(t_1) - \mathbf{f}(t_1, \mathbf{u}(t_1))).
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

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

Considerem-se, novamente, os zeros da expressão (3.23); tem-se que $c_1 = 0$ e $c_\nu = 1$. Agora, se $b_1 \neq 0$ e $b_\nu \neq 0$, obtêm-se os métodos Lobatto IIIB, métodos de ordem $p = 2\nu - 2$. O método Lobatto IIIB de ordem 4 é descrito pela tabela 3.10. Este integrador é um integrador simétrico [13].

3.2.3 Métodos Runge-Kutta particionados

Formulação

Considerem-se as equações diferenciais na forma particionada

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{z}), \quad \dot{\mathbf{z}} = \mathbf{g}(\mathbf{y}, \mathbf{z}), \quad (3.25)$$

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

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

$$\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{\nu 1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_\nu & a_{\nu 1} & \cdots & a_{\nu \nu} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_\nu \end{array} \quad \text{e} \quad \begin{array}{c|ccc} C_1 & A_{11} & \cdots & A_{\nu 1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_\nu & A_{\nu 1} & \cdots & A_{\nu \nu} \\ \hline & B_1 & \cdots & B_\nu \end{array}$$

Um método Runge-Kutta particionado para a solução de (3.25) é dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_i &= \mathbf{f} \left(\mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \mathbf{k}_j, \mathbf{z}_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} \mathbf{l}_j \right) \\ \mathbf{l}_i &= \mathbf{g} \left(\mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \mathbf{k}_j, \mathbf{z}_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} \mathbf{l}_j \right) \\ \mathbf{y}_1 &= \mathbf{y}_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{k}_i \\ \mathbf{z}_1 &= \mathbf{z}_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} B_i \mathbf{l}_i \end{aligned} \quad (3.26)$$

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

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

$$\sum_{ij} b_i A_{ij} = 1/2 \quad \text{e} \quad \sum_{ij} B_i a_{ij} = 1/2, \quad (3.27)$$

admitindo que as condições (3.16) se verificam. As condições (3.27) são automaticamente satisfeitas por métodos particionados com os mesmo nodos na quadratura, o que se traduz em

$$c_i = C_i, \quad \text{para todo o } i, \quad (3.28)$$

onde $c_i = \sum_j a_{ij}$ e $C_i = \sum_j A_{ij}$. No caso de (3.28) se verificar, as condições para que um método Runge-Kutta particionado seja de ordem 3 são

$$\sum_{ij} b_i A_{ij} c_j = 1/6 \quad \text{e} \quad \sum_{ij} B_i a_{ij} c_j = 1/6. \quad (3.29)$$

O par Lobatto IIIA - IIIB

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

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

Métodos de Nyström

Considerem-se as equações diferenciais de segunda ordem

$$\ddot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}(t, \mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}). \quad (3.30)$$

Introduzindo a variável $\mathbf{z} = \dot{\mathbf{y}}$, o problema (3.30) assume a forma de um sistema particionado

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{z}, \quad \dot{\mathbf{z}} = \mathbf{g}(t, \mathbf{y}, \mathbf{z}). \quad (3.31)$$

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

$$\bar{a}_{ij} = \sum_{k=1}^{\nu} a_{ik} A_{kj}, \quad \bar{b}_i = \sum_{k=1}^{\nu} b_k A_{ki}. \quad (3.32)$$

Um método de Nyström, solução do sistema (3.30), é dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{l}_i &= \mathbf{g} \left(t_0 + c_i h, \mathbf{y}_0 + c_i h \dot{\mathbf{y}}_0 + h^2 \sum_{j=1}^{\nu} \bar{a}_{ij} \mathbf{l}_j, \dot{\mathbf{y}}_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} \mathbf{l}_j \right) \\ \mathbf{y}_1 &= \mathbf{y}_0 + h \dot{\mathbf{y}}_0 + h^2 \sum_{i=1}^{\nu} \bar{b}_i \mathbf{l}_i \\ \dot{\mathbf{y}}_1 &= \dot{\mathbf{y}}_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} B_i \mathbf{l}_i. \end{aligned} \quad (3.33)$$

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

Um sistema de equações diferenciais da forma

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{q}), \quad \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{v}, \quad (3.34)$$

ou então, de forma equivalente,

$$\frac{d^2\mathbf{q}}{dt^2} = \mathbf{f}(\mathbf{q}), \quad (3.35)$$

pode ser eficientemente integrado por um método de Runge-Kutta-Nyström [34], com a tabela

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

onde

$$\begin{aligned} \beta_i &= \sum_{j=1}^{\nu} B_j a_{ji}, & i = 1, \dots, \nu, \\ \gamma_i &= \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij}, & i = 1, \dots, \nu, \\ \alpha_{ij} &= \sum_{k=1}^{\nu} A_{ik} a_{kj} & i, j = 1, \dots, \nu. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Os estágios intermédios \mathbf{Q}^i são

$$\mathbf{Q}^i = \mathbf{q}^n + h \gamma_i \mathbf{v}_n + h^2 \sum_{j=1}^{\nu} \alpha_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{Q}^j, t_n + \gamma_j h), \quad (3.37)$$

e as aproximações são dadas por

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_n + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{f}(\mathbf{Q}^i, t_n + \gamma_i h) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h \mathbf{v}_n + h^2 \sum_{i=1}^{\nu} \beta_i \mathbf{f}(\mathbf{Q}^i, t_n + \gamma_i h).\end{aligned}\tag{3.38}$$

Problemas com hamiltonianos separáveis

Considere-se um caso particular das equações (3.25)

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{q}), \quad \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{g}(\mathbf{p}),\tag{3.39}$$

onde as p componentes são integradas por um método Runge-Kutta e as q componentes por um método Runge-Kutta diferente. Neste caso, obtém-se [34]

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_n + h_{n+1} \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{f}(\mathbf{Q}_i, t_n + C_i h_{n+1}) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h_{n+1} \sum_{i=1}^{\nu} B_i \mathbf{g}(\mathbf{P}_i),\end{aligned}\tag{3.40}$$

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

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_i &= \mathbf{p}_n + h_{n+1} \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{Q}^j, t_n + C_j h_{n+1}) \\ \mathbf{Q}^i &= \mathbf{q}^n + h_{n+1} \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} \mathbf{g}(\mathbf{P}_j),\end{aligned}\tag{3.41}$$

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

No caso de $a_{ij} = A_{ij} = 0$, para $i \leq j$, o método é explícito. Se $a_{ij} = 0$ para $i < j$ e $A_{ij} = 0$ para $i \leq j$, o método ainda é explícito, devido à estrutura especial de (3.59); Analogamente se $a_{ij} = 0$ para $i \leq j$ e $A_{ij} = 0$ para $i < j$. Se $a_{ij} = A_{ij} = 0$, para $i < j$, então o método é implícito.

3.3 Método Störmer-Verlet

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

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

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

$$\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{f}(\mathbf{q}), \quad (3.42)$$

onde $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = -M^{-1}\nabla V(\mathbf{q})$ não depende de $\dot{\mathbf{q}}$. Muitos problemas em astronomia, dinâmica molecular e outras áreas da física assumem esta forma. A discretização natural de (3.42) é

$$\mathbf{q}^{n+1} - 2\mathbf{q}^n + \mathbf{q}^{n-1} = h^2 \mathbf{f}(\mathbf{q}^n), \quad (3.43)$$

que determina \mathbf{q}^{n+1} , quando \mathbf{q}^n e \mathbf{q}^{n-1} são conhecidos. O método (3.43) designa-se por método Störmer no campo da astronomia, método Verlet no campo da dinâmica molecular e *leapfrog* no campo das equações diferenciais parciais.

(3.43) é uma formulação de passo duplo; para obter uma formulação de passo simples, procede-se como se segue. A introdução da velocidade $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{q}}$ transforma a equação (3.42) num sistema de primeira ordem

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{v}, \quad \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{f}(\mathbf{q}). \quad (3.44)$$

Agora, considerem-se as seguintes aproximações discretas

$$\mathbf{v}_n = \frac{\mathbf{q}^{n+1} - \mathbf{q}^{n-1}}{2h}, \quad \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{q}^n - \mathbf{q}^{n-1}}{h}, \quad \mathbf{q}^{n-\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{q}^n + \mathbf{q}^{n-1}}{2}. \quad (3.45)$$

Para o problema (3.42), são dadas as condições iniciais $\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}^0$ e $\dot{\mathbf{q}}(0) = \mathbf{v}_0$; o valor \mathbf{q}^1 , necessário para iniciar a integração em (3.43), é

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

obtido por fazer $n = 0$ em (3.43), na expressão \mathbf{v}_n em (3.45) e eliminando o valor \mathbf{q}^{-1} . Substituindo as expressões (3.45) em (3.43), obtém-se

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

método de passo simples explícito

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

para o sistema de primeira ordem (3.44).

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

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

Encadeando as equações (3.46) e (3.47), obtém-se o seguinte método

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}} + h\mathbf{f}(\mathbf{q}^n) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}},\end{aligned}\tag{3.48}$$

que é mais económico em termos de implementação e numericamente mais estável do que (3.43) [14].

O método Störmer-Verlet pode ser perspectivado como a composição de dois métodos de Euler simpléticos. Das expressões (3.46) e (3.47) decorrem os algoritmos $(\mathbf{v}_n, \mathbf{q}^n) \mapsto (\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}})$

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^n) \\ \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}^n + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}},\end{aligned}\tag{3.49}$$

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

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{n+1}).\end{aligned}\tag{3.50}$$

Os métodos (3.49) e (3.50) enquadram-se na expressão (3.10), ou seja, ambos são métodos de Euler simpléticos, na medida em que uma das variáveis é usada no valor antigo e a outra variável no valor mais recente.

O algoritmo (3.46) é dado pela composição dos algoritmos (3.49) e (3.50), ao passo que o algoritmo (3.47) é dado pela composição dos algoritmos (3.50) e (3.49), de tal forma que é legítimo afirmar que o método de Störmer-Verlet é dado pela composição de dois métodos de Euler simpléticos.

O método Störmer-Verlet também pode ser visto como um método de decomposição ou separável [11, 13]. Um método diz-se separável se for possível decompor o campo vectorial em dois campos vectoriais integráveis e, então, tratá-los separadamente. Considere-se o campo vectorial $(\mathbf{v}, \mathbf{f}(\mathbf{q}))$ de (3.44) separado como a soma dos campos vectoriais $(\mathbf{v}, \mathbf{0})$ e $(\mathbf{0}, \mathbf{f}(\mathbf{q}))$. Os fluxos exactos destes dois campos vectoriais são dados por

$$\psi_t^{[1]} : \begin{cases} \mathbf{q}^1 &= \mathbf{q}^0 + t \cdot \mathbf{v}_0 \\ \mathbf{v}_1 &= \mathbf{v}_0 \end{cases} \quad \psi_t^{[2]} : \begin{cases} \mathbf{q}^1 &= \mathbf{q}^0 \\ \mathbf{v}_1 &= \mathbf{v}_0 + t \cdot \mathbf{f}(\mathbf{q}^0). \end{cases}\tag{3.51}$$

O método simplético (3.49) é dado pela composição de $\psi_{\frac{h}{2}}^{[2]}$ com $\psi_{\frac{h}{2}}^{[1]}$, ao passo que o método simplético (3.50) é dado pela composição de $\psi_{\frac{h}{2}}^{[1]}$ com $\psi_{\frac{h}{2}}^{[2]}$, ou seja,

$$(3.49) = \psi_{\frac{h}{2}}^{[1]} \circ \psi_{\frac{h}{2}}^{[2]}$$

$$(3.50) = \psi_{\frac{h}{2}}^{[2]} \circ \psi_{\frac{h}{2}}^{[1]}.$$

Mas, atendendo a que

$$(3.46) = (3.50) \circ (3.49)$$

$$(3.47) = (3.49) \circ (3.50)$$

obtém-se

$$\begin{aligned}\Phi_h^{(3.46)} &= \psi_{\frac{h}{2}}^{[2]} \circ \psi_h^{[1]} \circ \psi_{\frac{h}{2}}^{[2]} \\ \Phi_h^{(3.47)} &= \psi_{\frac{h}{2}}^{[1]} \circ \psi_h^{[2]} \circ \psi_{\frac{h}{2}}^{[1]}.\end{aligned}\tag{3.52}$$

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

O método Stormer-Verlet (3.46) pode ser visto como um método Runge-Kutta particionado com as tabelas

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

A ordem do método Störmer-Verlet é ordem 2 porque, sendo um método Runge-Kutta particionado, enquadra-se nas condições (3.27). Ora, uma desvantagem do método Störmer-Verlet reside no facto de, precisamente, ser um método de ordem 2 e, por isso, ineficiente para computações que exigem muita precisão (por exemplo, simulações do movimento planetário) [11]. No entanto, o seu uso é tão popular já que combina dois aspectos bastante favoráveis: por um lado, é um método explícito e, por outro lado, só é necessário calcular a força $-\nabla V$ uma única vez, por cada passo (enquanto que, por exemplo, um método Runge-Kutta de ordem 2 tem de avaliar a força duas vezes).

O método Störmer-Verlet (3.46) é um método de Nyström (3.33) para problemas da forma $\ddot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}(t, \mathbf{y})$. Considera-se $\nu = 2$ e faz-se $c_1 = 0, c_2 = 1, \bar{a}_{11} = \bar{a}_{12} = \bar{a}_{22} = 0, \bar{a}_{21} = 1/2, \bar{b}_1 = 1/2, \bar{b}_2 = 0$ e $B_1 = B_2 = 1/2$.

Para o Störmer-Verlet (3.47), considera-se $\nu = 1$ e faz-se $c_1 = 1/2, \bar{a}_{11} = 0$ e $\bar{b}_1 = B_1 = 1$.

3.4 O Método Newmark

Considere-se uma lagrangiana contínua dada pela diferença entre a energia cinética e a energia potencial, da forma (4.3). As equações de Euler-Lagrange correspondentes são

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

A família dos integradores Newmark é usada com grande frequência na dinâmica estrutural. Sejam γ e β reais, $0 \leq \gamma \leq 1, 0 \leq \beta \leq \frac{1}{2}$. Dado (q^k, \dot{q}^k) , o método Newmark

determina (q^{k+1}, \dot{q}^{k+1}) tal que

$$\begin{aligned} q^{k+1} &= q^k + h\dot{q}^k + \frac{h^2}{2} [(1 - 2\beta)a_k + 2\beta a_{k+1}] \\ \dot{q}^{k+1} &= \dot{q}^k + h[(1 - \gamma)a_k + \gamma a_{k+1}], \end{aligned} \quad (3.53)$$

onde

$$a_k = M^{-1}(-\nabla V(q^k)). \quad (3.54)$$

O algoritmo é de segunda ordem se e só se $\gamma = \frac{1}{2}$; caso contrário só é consistente. Se $\beta = 0$, (3.53) é explícita para q^{k+1} , ou seja, obtém-se o Newmark explícito.

As expressões das velocidades no algoritmo Newmark podem ser determinadas a partir da primeira equação de (3.53), obtendo-se

$$\begin{aligned} \dot{q}^k &= \frac{1}{h}(q^{k+1} - q^k) - \frac{h}{2} [(1 - 2\beta)a_k + 2\beta a_{k+1}] \\ \dot{q}^{k+1} &= \frac{1}{h}(q^{k+2} - q^{k+1}) - \frac{h}{2} [(1 - 2\beta)a_{k+1} + 2\beta a_{k+2}]. \end{aligned}$$

Agora, substituindo estas duas expressões na segunda equação de (3.53), obtém-se

$$\frac{1}{h^2}(q^{k+2} - 2q^{k+1} + q^k) - \beta a_{k+2} + (2\beta - \gamma - \frac{1}{2})a_{k+1} + (-\beta + \gamma - \frac{1}{2})a_k = 0 \quad (3.55)$$

O método Newmark forçado

O Newmark forçado, com força externa dada por $f(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$, é dado por

$$\begin{aligned} q^{k+1} &= q^k + h\dot{q}^k + \frac{h^2}{2} [(1 - 2\beta)a_k + 2\beta a_{k+1}] \\ \dot{q}^{k+1} &= \dot{q}^k + h[(1 - \gamma)a_k + \gamma a_{k+1}], \end{aligned} \quad (3.56)$$

onde

$$a_k = M^{-1}[-\nabla V(q^k) + f(q^k, \dot{q}^k)]. \quad (3.57)$$

Para h suficientemente pequeno e usando o teorema da função implícita, as equações (3.56) e (3.57) definem uma função $(q^k, q^{k+1}) \mapsto (\dot{q}^k, \dot{q}^{k+1})$ [18]; tal permite substituir a expressão (3.57) por

$$\begin{aligned} f_{NM}^{\beta-}(q^k, q^{k+1}) &= f(q^k, \dot{q}^k) \\ f_{NM}^{\beta+}(q^k, q^{k+1}) &= f(q^{k+1}, \dot{q}^{k+1}). \end{aligned} \quad (3.58)$$

A expressão forçada, análoga a (3.55), é dada por

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h}(q^{k+2} - 2q^{k+1} + q^k) \\ & + \beta h M^{-1} \nabla V(q^{k+2}) - (2\beta - 1) h M^{-1} \nabla V(q^{k+1}) + \beta h M^{-1} V(q^k) \\ & - \beta h M^{-1} f_{NM}^{\beta+}(q^{k+1}, q^{k+2}) + \frac{1}{2}(2\beta - 1) h M^{-1} f_{NM}^{\beta-}(q^{k+1}, q^{k+2}) \\ & + \frac{1}{2}(2\beta - 1) h M^{-1} f_{NM}^{\beta+}(q^k, q^{k+1}) - \beta h M^{-1} f_{NM}^{\beta-}(q^k, q^{k+1}) = 0. \end{aligned}$$

3.5 SHAKE e RATTLE

Considere-se o sistema hamiltoniano (2.5), com $\mathbf{q}, \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ e $H : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ suficientemente suave. Em aplicações no contexto da mecânica, astronomia e da dinâmica molecular, a Hamiltoniana H é, tipicamente, da forma

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T M^{-1} \mathbf{p} + V(\mathbf{q}), \quad (3.59)$$

onde M é uma matriz de massa definida positiva e o potencial é dado por $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Neste caso, o sistema hamiltoniano é

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= M^{-1} \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial V(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}}, \end{aligned} \quad (3.60)$$

onde $\mathbf{q}, \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ representam as posições e as quantidades de movimento das partículas. No campo da dinâmica molecular \mathbf{q} e \mathbf{p} representam a posição dos átomos de uma molécula e a sua quantidade de movimento, respectivamente; os átomos são perspectivados como pontos de massa, sendo M tipicamente diagonal.

Ao modelo podem ser adicionadas restrições holónomas da forma $g(\mathbf{q}) = 0$, resultando o modelo

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= M^{-1} \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial V(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial g(\mathbf{q})^T}{\partial \mathbf{q}} \boldsymbol{\lambda} \\ g(\mathbf{q}) &= 0, \end{aligned} \quad (3.61)$$

onde $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T$ representam os multiplicadores de Lagrange. As equações (3.61) definem uma restrição adicional que, neste sentido, está como que «escondida». A

condição

$$\frac{\partial g(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} M^{-1} \mathbf{p} = 0, \quad (3.62)$$

que resulta de $\frac{dg(\mathbf{q})}{dt} = 0$ (já que $g(\mathbf{q}(t)) = 0$ para todo o t), deve ser satisfeita pelos valores iniciais $(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)$, por forma a garantir-se a existência de soluções suaves.

[32] deriva as equações (3.61) considerando a seguinte Hamiltoniana H

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + \frac{1}{2\epsilon} g(\mathbf{q})^T g(\mathbf{q}),$$

onde $0 < \epsilon \ll 1$. As equações do movimento correspondentes são

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{q}} - \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial g(\mathbf{q})^T}{\partial \mathbf{q}} g(\mathbf{q}). \end{aligned}$$

Introduzindo a variável $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$

$$\boldsymbol{\lambda} = \frac{1}{\epsilon} g(\mathbf{q})$$

as equações são reescritas como

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial g(\mathbf{q})^T}{\partial \mathbf{q}} \boldsymbol{\lambda} \\ \boldsymbol{\lambda} &= \frac{1}{\epsilon} g(\mathbf{q}). \end{aligned}$$

No limite, quando $\epsilon \rightarrow 0$, obtém-se o sistema (3.61).

O algoritmo Verlet é usado para integrar equações da forma (3.60), sistemas sem quaisquer constrangimentos. Uma integração numérica directa das equações (3.61), baseada no método Verlet e que preserva os constrangimentos, é dado pelo algoritmo SHAKE. Este algoritmo foi, posteriormente, reformulado pelo algoritmo RATTLE.

3.5.1 SHAKE

Considere-se o sistema com Hamiltoniana separável (3.59). Se o movimento estiver restrito a $g(\mathbf{q}) = 0$, com $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^m$, $m < d$, a equação do movimento é a equação diferencial de segunda ordem

$$M\ddot{\mathbf{q}} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}) - G(\mathbf{q})^T \boldsymbol{\lambda},$$

onde $g(\mathbf{q}) = 0$, $G(\mathbf{q}) = \frac{\partial g}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q})$ e $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T$ representam os multiplicadores de Lagrange.

No contexto da dinâmica molecular, surge o integrador

$$\begin{aligned} q^{n+1} - 2q^n + q^{n-1} &= -h^2 M^{-1} \left(\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(q^n) + G(q^n)^T \lambda_n \right) \\ 0 &= g(q^{n+1}), \end{aligned} \quad (3.63)$$

chamado algoritmo SHAKE. As \mathbf{p} -componentes são aproximadas por

$$p_n = \frac{M(q^{n+1} - q^{n-1})}{2h}. \quad (3.64)$$

3.5.2 RATTLE

As equações (3.63) podem ser reescritas como um método de passo simples, obtendo-se

$$\begin{aligned} p_{n+\frac{1}{2}} &= p_n - \frac{h}{2} \left(\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(q^n) + G(q^n)^T \lambda_n \right) \\ q^{n+1} &= q^n + hM^{-1}p_{n+\frac{1}{2}} \\ 0 &= g(q^{n+1}) \\ p_{n+1} &= p_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2} \left(\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(q^{n+1}) + G(q^{n+1})^T \lambda_{n+1} \right). \end{aligned} \quad (3.65)$$

Como λ_{n+1} ainda não está disponível, uma vez que é calculado juntamente com q^{n+2} , pode substituir-se a última equação de (3.65) pela projecção

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2} \left(\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(q^{n+1}) + G(q^{n+1})^T \mu_n \right) \\ 0 &= G(q^{n+1})M^{-1}p_{n+1}, \end{aligned} \quad (3.66)$$

obtendo-se um integrador numérico designado por RATTLE.

O método RATTLE pode ser aplicado a Hamiltonianas genéricas. Para $(p_n, q^n) \in M$,

sendo M é definido pela equação (3.12), tem-se

$$\begin{aligned}
 p_{n+\frac{1}{2}} &= p_n - \frac{h}{2} \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(p_{n+\frac{1}{2}}, q^n) + G(q^n)^T \lambda_n \right) \\
 q^{n+1} &= q^n + \frac{h}{2} \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(p_{n+\frac{1}{2}}, q^n) + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(p_{n+\frac{1}{2}}, q^{n+1}) \right) \\
 0 &= g(q^{n+1}) \\
 p_{n+1} &= p_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2} \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(p_{n+\frac{1}{2}}, q^{n+1}) + G(q^{n+1})^T \mu_n \right) \\
 0 &= G(q^{n+1}) \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(p_{n+1}, q^{n+1}).
 \end{aligned} \tag{3.67}$$

Capítulo 4

Integradores geométricos

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

Neste sentido, algumas questões se colocam; naturalmente, uma delas é, sem dúvida, como construir integradores desta natureza, integradores geométricos? Será que algum dos integradores chamados clássicos, que foram desenhados sem levar em conta a preservação das características qualitativas do sistema a integrar, são integradores geométricos? Ou, só o serão em determinadas condições? Outro ponto a ter em mente é a questão da opção - se não for possível que o integrador partilhe todas as características do sistema contínuo, quais as características a eleger?

Atente-se à escolha entre simplecticidade e conservação da energia. Um integrador simpléctico ψ_h com passo temporal constante não pode conservar, exactamente, a energia - excepto nos casos em que ψ_h coincide com o fluxo do sistema de equações diferenciais ou então, é uma sua reparametrização (por exemplo, os sistemas integráveis são uma excepção a esta regra) [9]. Consequentemente, em geral, um integrador numérico não pode, em simultâneo, conservar a energia e a estrutura simpléctica - este resultado induziu uma dicotomia na

literatura entre, por um lado, integradores que conservam a estrutura simpléctica e a quantidade de movimento, e por outro lado, integradores que conservam a energia e a quantidade de movimento. Neste contexto, e tendo em mente que um sistema hamiltoniano conserva a energia e a estrutura simpléctica, a questão pertinente a colocar é - opta-se por conservar a energia ou por conservar a estrutura simpléctica? Embora a opção dependa da aplicação específica, a resposta pode ser ponderada da seguinte forma [34]:

- (i) a simplecticidade é uma propriedade que caracteriza sistemas hamiltonianos, ao passo que a conservação da energia é uma característica partilhada, também, por sistemas não hamiltonianos. Aliás, embora os integradores simplécticos não conservem, exactamente, o valor de H , eles conservam-no de forma aproximada. A «boa» conservação da energia (em termos aproximados) produzida pelos integradores simplécticos relaciona-se com a análise *backward* do erro, em particular, com o teorema (4.8). A ideia básica passa por mostrar que o algoritmo conserva exactamente a energia, a menos de termos exponencialmente pequenos, de um sistema hamiltoniano próximo (no entanto, se o passo temporal for demasiado grande, a energia pode apresentar um mau comportamento, mesmo no caso de os integradores serem simplécticos);
- (ii) a conservação da energia restringe a dinâmica da solução numérica, ao forçá-la a ser calculada na $(2d - 1)$ -variedade com H constante, mas não impõe nenhuma outra restrição a essa dinâmica; na $(2d - 1)$ -variedade a solução numérica é livre no seu movimento, sendo unicamente negados movimentos ortogonais à variedade. Quando d é grande, esta restrição é fraca. Mas, a simplecticidade restringe a dinâmica de uma forma mais global - todas as direcções no espaço de fases são levadas em conta.

A dicotomia integradores simplécticos-quantidade de movimento e integradores energia-quantidade de movimento só existe quando os integradores têm passo temporal constante. Pode «ter-se tudo», se forem usados algoritmos adaptativos [23], mas o preço a pagar passa pela eficiência computacional ou pela estabilidade [24].

Não sendo possível, para um passo temporal constante, obter integradores que preservem a simplecticidade e a energia, por que não optar pela conservação da energia? Embora seja possível construir tais integradores, eles exibem propriedades numéricas desinteressantes [20]. Por exemplo, em geral, são implícitos e, por isso, requerem a resolução de

um sistema de equações não lineares em cada passo. Além do mais, em casos típicos, o comportamento qualitativo da solução numérica é pior do que o obtido com integradores simplécticos, mais fáceis de implementar.

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

Em face da relevância da symplecticidade, como construir integradores simplécticos? A literatura indica alguns caminhos, nomeadamente, o uso de funções geradoras, métodos *splitting* e métodos variacionais. Um integrador variacional é um integrador que é a equação de Euler-Lagrange discreta, para uma dada Lagrangiana discreta. Os integradores de natureza variacional apresentam a grande vantagem de serem simplécticos e de, adicionalmente, conservarem as funções quantidades de movimento que decorrem de simetrias na acção. Além do mais, a aproximação variacional permite a integração de sistemas conservativos, mas também de sistemas forçados, dissipativos e com restrições. A ideia subjacente à derivação dos integradores variacionais é a discretização do princípio variacional de Hamilton. No caso de sistemas conservativos, usam-se os princípios variacionais usuais na mecânica e, para sistemas dissipativos, recorre-se ao princípio de Lagrange-d'Alembert, sendo possível incorporar os efeitos dissipativos no princípio variacional. Os sistemas com restrições podem ser integrados por integradores variacionais via multiplicadores de Lagrange; a vantagem da aproximação variacional reside na não perturbação da natureza simpléctica ou conservativa dos algoritmos devido à existência de restrições [18].

Outra vantagem dos integradores variacionais é que a aproximação variacional possibilita a construção de integradores de ordem elevada, de uma maneira mais fácil e eficiente do que determinar soluções aproximadas da equação de Hamilton-Jacobi [23]. Por exemplo, pode aproximar-se directamente a acção com um grau de precisão escolhido, usando uma quadratura adequada, obtendo-se um integrador variacional de igual ordem. É também de salientar que os integradores variacionais são flexíveis, no sentido de que incluem al-

goritmos explícitos e implícitos. Adicionalmente, a metodologia variacional indicou o caminho para os integradores multisimpléticos, no contexto das equações diferenciais parciais. De salientar, também, o excelente comportamento dos integradores variacionais em termos do comportamento da energia, tanto no caso conservativo como no caso dissipativo. Por fim, não se ignore a *performance* dos integradores variacionais associada a quantidades estatísticas. Por exemplo, em sistemas caóticos, faz muito mais sentido determinar correctamente quantidades estatísticas do que trajectórias individuais. Neste campo, os integradores variacionais «retratam a física correctamente» [23]; por exemplo, uma quantidade estatística de interesse é a temperatura de um sistema de partículas, entidade que não está associada a nenhuma quantidade conservada mas que, no entanto, os integradores variacionais conseguem captar de forma muito interessante.

Tal como no caso contínuo, a mecânica variacional discreta tem uma abordagem lagrangiana e uma abordagem hamiltoniana; estas duas visões não se excluem, mas são complementares, fornecendo o suporte teórico necessário para a derivação de integradores que, na prática, são eficientes. Em síntese os integradores variacionais parecem ser «naturais» em contextos diversos e com resultados extremamente bons em termos práticos [30].

Na derivação dos integradores variacionais, [27] opta por construir Lagrangianas discretas que aproximam a Lagrangiana discreta exacta. A justificação avançada prende-se:

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

Neste seguimento, faz-se uma explanação sumária da mecânica variacional discreta subjacente à posterior derivação dos integradores variacionais que, por direito próprio, são integradores geométricos. Reforce-se a ideia de que, em sistemas conservativos, os integradores variacionais são simpléticos e conservam as funções quantidades de movimento [23]. A conservação das funções quantidades de movimento significa que quando o sistema discreto tem uma simetria, então existe um teorema de Noether discreto que fornece a quantidade que é exactamente conservada ao nível discreto. Uma das vantagens da aproximação variacional discreta é o facto de que o vínculo entre simetrias e

quantidades conservadas é o mesmo do nível contínuo [24]; tal significa que, construindo um princípio variacional discreto com respeito a simetrias (por exemplo, invariância rotacional ou quantidade de movimento angular), então existe uma quantidade conservada que é exactamente respeitada pelo integrador. Tal não acontece com todos os métodos numéricos, mesmo que tenham uma ordem mais elevada do que o integrador variacional. Numa fase posterior, faz-se uma breve síntese sobre os integradores que têm uma natureza geométrica, ou então, indicam-se as condições a verificar para que o sejam. Antes de iniciar a derivação das equações de Euler-Lagrange discretas, equações que definem implicitamente um algoritmo em $Q \times Q$ que aproxima o fluxo das equações de Euler-Lagrange contínuas, relembrem-se os conceitos de ordem de um integrador, erro local e erro global.

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

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

para todo $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in U$ e $h \leq h_l$. A expressão que figura no lado esquerdo da inequação designa-se por erro local. Um método que tenha, pelo menos, ordem 1 diz-se consistente. Um método ψ de X_H diz-se convergente de ordem r se existir um aberto $U \subset T^*Q$ e constantes $C_g > 0$ e $T_g > 0$ tal que

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

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

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

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

A derivação das equações de Euler-Lagrange discretas pode ser feita conforme se segue [27]. Considerem-se, não a posição \mathbf{q} e a velocidade $\dot{\mathbf{q}}$, mas duas posições q_0 e q_1 . Seja $h \in \mathbb{R}$ o passo temporal. As posições q_0 e q_1 podem ser vistas como dois pontos numa curva, ou seja, $q_0 \approx q(0)$ e $q_1 \approx q(h)$. Neste sentido, considera-se o espaço discreto $Q \times Q$ e uma Lagrangiana discreta $L_d : Q \times Q \rightarrow \mathbb{R}$.

Considere-se, a título de exemplo, a Lagrangiana discreta $L_d(q_0, q_1, h)$, o qual aproxima a acção ao longo da curva, entre q_0 e q_1 , da forma

$$L_d(q_0, q_1, h) = h \left[\left(\frac{q_1 - q_0}{h} \right)^T M \left(\frac{q_1 - q_0}{h} \right) - V(q_0) \right],$$

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

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

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

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

De seguida, calcula-se variações desta acção discreta, mantendo os pontos extremos, q_0 e q_N , fixos, resultando

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

onde D_i representa a derivada em ordem à i -ésima posição, se usou a integração por partes discreta e o facto de que $\delta q_0 = \delta q_N = 0$. Impondo que as variações da acção sejam iguais

a zero para qualquer escolha de δq_k , obtêm-se as equações de Euler-Lagrange discretas

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

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

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

definido implicitamente por

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

ou seja

$$\psi_{L_d}(q_{k-1}, q_k) = (q_k, q_{k+1}).$$

Tal significa que, assumindo para condições iniciais (q_0, q_1) , as equações de Euler-Lagrange discretas podem ser vistas como uma regra recursiva para calcular a sequência $\{q_k\}_{k=0}^N$. Então, elas definem uma função $\psi_{L_d} : (q_{k-1}, q_k) \mapsto (q_k, q_{k+1})$, de forma que (4.5) podem ser perspectivadas como um integrador de passo simples para o sistema das equações de Euler-Lagrange contínuas.

No caso da Lagrangiana escolhida, tem-se

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

e

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

sendo as equações de Euler-Lagrange

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

que traduzem a discretização das equações de Newton.

Um outro exemplo é dado pela Lagrangiana

$$L_d^\alpha(q_0, q_1, h) = hL \left((1 - \alpha)q_0 + \alpha q_1, \frac{q_1 - q_0}{h} \right) \quad (4.6)$$

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

$$L_d^\alpha(q_0, q_1) = \frac{h}{2} \left(\frac{q_1 - q_0}{h} \right)^T M \left(\frac{q_1 - q_0}{h} \right) - hV((1 - \alpha)q_0 + \alpha q_1),$$

originando as seguintes equações de Euler-Lagrange

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

Fazendo

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

(4.7) é reescrita como

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

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

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

$$L_d^{sim,\alpha}(q_0, q_1) = \frac{h}{2}L\left((1 - \alpha)q_0 + \alpha q_1, \frac{q_1 - q_0}{h}\right) + \frac{h}{2}L\left(\alpha q_0 + (1 - \alpha)q_1, \frac{q_1 - q_0}{h}\right), \quad (4.9)$$

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

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

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

A derivação das equações de Euler-Lagrange discretas apresentada pode ser sintetizada no teorema seguinte [27]. O caminho discreto é

$$C_d(Q) = \{q_d : \{t_k\}_{k=0}^N \rightarrow Q\},$$

onde $\{t_k = kh, k = 0, \dots, N\}$. O espaço tangente a C_d no ponto q_d é $T_{q_d}C_d(Q)$. \ddot{Q}_d é o conjunto de pares da forma $((q_0, q_1), (q_1, q_2))$.

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

$$dA_d \cdot \delta q_d$$

é dado por

$$\sum_{k=1}^{N-1} D_{DEL}L_d((q_{k-1}, q_k), (q_k, q_{k+1})) \cdot \delta q_k + \omega_{L_d}^{1+}(q_{N-1}, q_N) \cdot (\delta q_{N-1}, \delta q_N) - \omega_{L_d}^{1-}(q_0, q_1) \cdot (\delta q_0, \delta q_1). \quad (4.11)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \omega_{L_d}^{1+} &= D_2L_d(q_0, q_1)dq_1 = \frac{\partial L_d}{\partial q_1^i} dq_1^i, \\ \omega_{L_d}^{1-} &= -D_1L_d(q_0, q_1)dq_0 = -\frac{\partial L_d}{\partial q_0^i} dq_0^i. \end{aligned} \quad (4.12)$$

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

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

e, por outro lado,

$$d^2 = 0$$

ou seja,

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

O análogo de um campo vectorial contínuo é o operador evolução discreto $X : Q \times Q \rightarrow (Q \times Q) \times (Q \times Q)$ que satisfaz $\pi \circ X = id$, onde π é o operador projecção definido por $\pi : ((q_0, q_1), (q'_0, q'_1)) \mapsto (q_0, q_1)$. O análogo do fluxo é a função discreta $\psi : Q \times Q \rightarrow Q \times Q$ definida por $\psi = \sigma \circ X$, onde σ é o operador translação definido por $\sigma : ((q_0, q_1), (q'_0, q'_1)) \mapsto (q'_0, q'_1)$. Reescrevendo em coordenadas, se $X : (q_0, q_1) \mapsto (q_0, q_1, q'_0, q'_1)$, então, $\psi : (q_0, q_1) \mapsto (q'_0, q'_1)$. Particularizando para um sistema lagrangiano discreto, o operador evolução lagrangiana discreta X_{L_d} satisfaz

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

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

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

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

As equações de Euler-Lagrange discretas (4.5) podem ser deduzidas a partir da expressão (4.11); um caminho discreto $q_d \in C_d(Q)$ satisfaz as equações de Euler-Lagrange discretas se o primeiro termo da expressão (4.11) for nulo, para todas as variações $\delta q_d \in T_{q_d}C_d(Q)$. Tal significa que os pontos $\{q_k\}$ satisfazem $\psi_{L_d}(q_{k-1}, q_k) = (q_k, q_{k+1})$.

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

$$\begin{aligned} T_{L_d}^+(q_0, q_1) \cdot \delta q_1 &= D_2 L_d(q_0, q_1) \cdot \delta q_1 \\ T_{L_d}^-(q_0, q_1) \cdot \delta q_0 &= -D_1 L_d(q_0, q_1) \cdot \delta q_0, \end{aligned} \tag{4.13}$$

as quais podem ser escritas como

$$\begin{aligned} T_{L_d}^+ : (q_0, q_1) &\mapsto (q_1, p_1) = (q_1, D_2 L_d(q_0, q_1)) \\ T_{L_d}^- : (q_0, q_1) &\mapsto (q_0, p_0) = (q_0, -D_1 L_d(q_0, q_1)). \end{aligned} \tag{4.14}$$

Se ambas as transformações de Legendre discretas forem isomorfismos locais, então a Lagrangiana discreta L_d diz-se regular; se forem isomorfismos globais, então L_d diz-se hiperregular.

As 1-formas ω^1 lagrangiana e hamiltoniana relacionam-se pela expressão

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

e as 2-formas ω^2 pela expressão

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

Dado $L_d : Q \times Q \rightarrow \mathbb{R}$, o operador evolução lagrangiana discreta X_{L_d} e o análogo discreto do fluxo, ψ_{L_d} , estão bem definidos se e só se $T_{L_d}^-$ for um isomorfismo local. Também, a natureza regular de L_d é equivalente a afirmar que ψ_{L_d} está bem definida e é invertível [27].

O análogo discreto do fluxo lagrangiano, $\psi_{L_d} : Q \times Q \rightarrow Q \times Q$, quando empurrado

para T^*Q , origina a função $\psi_{H_d} : T^*Q \rightarrow T^*Q$ que, de acordo com [27], tem as seguintes expressões, equivalentes entre si:

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

Em coordenadas, $\psi_{H_d} : (q_0, p_0) \mapsto (q_1, p_1)$, onde

$$\begin{aligned}p_0 &= -D_1 L_d(q_0, q_1) \\ p_1 &= D_2 L_d(q_0, q_1).\end{aligned}\tag{4.15}$$

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

$$\begin{aligned}p_k &= -D_1 L_d(q_k, q_{k+1}, h) \\ p_{k+1} &= D_2 L_d(q_k, q_{k+1}, h),\end{aligned}\tag{4.16}$$

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

Por exemplo, fazendo o *pushforward* do algoritmo variacional (4.10), com a transformada de Legendre

$$T_{L_d}^{sim,\alpha}(q_0, q_1) = \left(q_1, M \left[\frac{1}{h}(q_1 - q_0) + \frac{h}{2}(\alpha a_{0+k} + (1 - \alpha)a_{1-\alpha}) \right] \right),$$

obtém-se o algoritmo implícito $(q_k, p_k) \mapsto (q_{k+1}, p_{k+1})$ dado por

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

algoritmo de segunda ordem, para qualquer α .

4.2 Leis de conservação em sistemas discretos

4.2.1 Conservação da 2-forma simpléctica

A função ψ_{L_d} é simpléctica, ou seja, para um único passo, tem-se que [27, 39]

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

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

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

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

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

4.2.2 Conservação das funções quantidades de movimento

Considere-se a acção (esquerda ou direita) $\Phi : G \times Q \rightarrow Q$ de um grupo de Lie G em Q , com gerador infinitesimal ξ_Q . As funções quantidades de movimento lagrangianas discretas $J_{L_d}^+, J_{L_d}^- : Q \times Q \rightarrow \mathfrak{g}^*$ são dadas pela expressão

$$\begin{aligned} J_{L_d}^+(q_0, q_1) \cdot \xi &= \langle D_2 L_d(q_0, q_1), \xi_Q(q_1) \rangle, \\ J_{L_d}^-(q_0, q_1) \cdot \xi &= \langle -D_1 L_d(q_0, q_1), \xi_Q(q_0) \rangle. \end{aligned} \quad (4.20)$$

O teorema (A.9) tem uma versão discreta [27].

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

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

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

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

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

4.2.3 Conservação da energia

A literatura mostra que, no caso de integradores com passo temporal constante, existe uma dicotomia: ou eles conservam a symplecticidade e a quantidade de movimento, ou então conservam a energia e a quantidade de movimento. Os integradores variacionais enquadram-se no primeiro caso - são simplécticos e conservam a quantidade de movimento. No entanto, com passo temporal não constante, é possível obter integradores variacionais que preservam a symplecticidade, a energia e a quantidade de movimento [17].

Dado (q_0, q_1, h_0) , pretende-se determinar (q_1, q_2, h_1) ; em geral, tal possibilitará passar de (q_{k-1}, q_k, h_{k-1}) para (q_k, q_{k+1}, h_k) . Este procedimento difere do habitual, já que a informação sobre o passo temporal h_k está acoplada aos dados actuais (q_k, q_{k+1}) . Determinam-se h_1 e q_2 conjuntamente, por resolver uma equação similar à equação de Euler-Lagrange discreta para q_2 , ao passo que para h_1 usa-se a equação $E_d(q_0, q_1, h_0) = E_d(q_1, q_2, h_1)$, onde E_d é a função energia discreta [17].

A acção discreta é dada por

$$h_0 L_d(q_0, q_1, h_0) + h_1 L_d(q_1, q_2, h_1). \quad (4.21)$$

O algoritmo discreto é dado por

$$\frac{\partial}{\partial q_1} [h_0 L_d(q_0, q_1, h_0) + h_1 L_d(q_1, q_2, h_1)] = 0, \quad (4.22)$$

ou

$$h_0 D_2 L_d(q_0, q_1, h_0) + h_1 D_1 L_d(q_1, q_2, h_1) = 0,$$

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

$$E_d(q_0, q_1, h_0) = \frac{\partial}{\partial h_0} [h_0 L_d(q_0, q_1, h_0)]. \quad (4.23)$$

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

$$E_d(q_0, q_1, h_0) = \frac{1}{2} \left(\frac{q_1 - q_0}{h_0} \right)^T M \left(\frac{q_1 - q_0}{h_0} \right) + V((1 - \alpha)q_0 + \alpha q_1).$$

O algoritmo é constituído pelas equações (4.22) e

$$E_d(q_0, q_1, h_0) = E_d(q_1, q_2, h_1). \quad (4.24)$$

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

$$h_1^2 = \frac{(q_2 - q_1)^T M (q_2 - q_1)}{2[E_0 - V((1 - \alpha)q_1 + \alpha q_2)]},$$

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

Este algoritmo é simplético, preserva a quantidade de movimento e foi desenhado de forma a conservar a energia [17].

4.3 Sistemas discretos forçados

Considere-se um sistema não conservativo. Para problemas onde a parte não conservativa é dominante, o uso de integradores variacionais não traz grandes benefícios. No entanto, se o sistema for primariamente conservativo, com efeitos não conservativos muito fracos (por exemplo, com dissipação de Rayleigh), as técnicas variacionais são bastante interessantes. Os integradores variacionais no caso de sistemas dissipativos mas que são quase conservativos, nomeadamente em sistemas com fraca dissipação, são particularmente úteis, já que a sua *performance* é bastante interessante na parte conservativa do sistema, a parte onde os integradores tradicionais introduzem a maior parte do erro [18].

Considerem-se as duas forças lagrangianas discretas $f_d^+, f_d^- : Q \times Q \rightarrow T^*Q$, com coordenadas

$$\begin{aligned} f_d^+(q_0, q_1) &= (q_1, f_d^+(q_0, q_1)), \\ f_d^-(q_0, q_1) &= (q_0, f_d^-(q_0, q_1)). \end{aligned}$$

Usando o princípio de Lagrange-d'Alembert discreto obtêm-se as equações de Euler-Lagrange forçadas discretas [27]

$$D_2 L_d(q_{k-1}, q_k) + D_1 L_d(q_k, q_{k+1}) + f_d^+(q_{k-1}, q_k) + f_d^-(q_k, q_{k+1}) = 0. \quad (4.25)$$

As transformações de Legendre forçadas discretas

$$\begin{aligned} T_{L_d}^{f^+} : (q_0, q_1) &\mapsto (q_1, p_1) = (q_1, D_2 L_d(q_0, q_1) + f_d^+(q_0, q_1)), \\ T_{L_d}^{f^-} : (q_0, q_1) &\mapsto (q_0, p_0) = (q_0, -D_1 L_d(q_0, q_1) - f_d^-(q_0, q_1)), \end{aligned} \quad (4.26)$$

permitem determinar a função Hamiltoniana forçada discreta, $\psi_{H_d}^f : (q_0, p_0) \mapsto (q_1, p_1)$, definida por $\psi_{H_d}^f = T_{L_d}^{f\pm} \circ \psi_{L_d} \circ (T_{L_d}^{f\pm})^{-1}$, com coordenadas

$$\begin{aligned} p_0 &= -D_1 L_d(q_0, q_1) - f_d^-(q_0, q_1), \\ p_1 &= D_2 L_d(q_0, q_1) + f_d^+(q_0, q_1). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Considere-se a Lagrangiana discreta (4.6)

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

com $\alpha \in [0, 1]$. As forças discretas são

$$\begin{aligned} f_d^+(q_0, q_1, h) &= \alpha h f_L \left((1 - \alpha)q_0 + \alpha q_1, \frac{q_1 - q_0}{h} \right), \\ f_d^-(q_0, q_1, h) &= (1 - \alpha) h f_L \left((1 - \alpha)q_0 + \alpha q_1, \frac{q_1 - q_0}{h} \right). \end{aligned}$$

Para $L = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}^T M \dot{\mathbf{q}} - V(\mathbf{q})$, a função Hamiltoniana forçada discreta é

$$\begin{aligned} \frac{q_1 - q_0}{h} &= M^{-1}(\alpha p_0 + (1 - \alpha)p_1), \\ \frac{p_1 - p_0}{h} &= -\nabla V((1 - \alpha)q_0 + \alpha q_1) + f_H((1 - \alpha)q_0 + \alpha q_1, \alpha p_0 + (1 - \alpha)p_1), \end{aligned}$$

onde $f_H = (T_{L_d})^{-1} \circ f_L$.

Um outro exemplo é dado pela Lagrangiana discreta [24]

$$L_d = (q_0, q_1, h) = h \left(\frac{1}{2} \left(\frac{q_1 - q_0}{h} \right)^T M \left(\frac{q_1 - q_0}{h} \right) - V(q_0) \right),$$

onde M é a matriz de massa, simétrica e definida positiva. Considerando, agora, as forças discretas

$$\begin{aligned} f_d^-(q_k, q_{k+1}) &= f(q_k) \\ f_d^+(q_k, q_{k+1}) &= 0, \end{aligned}$$

obtêm-se as equações discretas de Euler-Lagrange forçadas

$$M \left(\frac{q_{k+1} - 2q_k + q_{k-1}}{h^2} \right) = -\nabla V(q_k) + f(q_k).$$

Para a Lagrangiana discreta $L_d^{sim,\alpha}$, dado pela expressão (4.9), as forças discretas são

$$\begin{aligned} f_d^{sim,\alpha-}(q_0, q_1) &= \frac{h}{2} \left[(1 - \alpha) f \left(q_{0+\alpha}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right) + \alpha f \left(q_{1-\alpha}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right) \right] \\ f_d^{sim,\alpha+}(q_0, q_1) &= \frac{h}{2} \left[\alpha f \left(q_{0+\alpha}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right) + (1 - \alpha) f \left(q_{1-\alpha}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right) \right], \end{aligned}$$

onde $q_{k+\alpha} = (1 - \alpha)q_k + \alpha q_{k+1}$.

Para o caso particular da Lagrangiana da forma $L = \frac{1}{2}\dot{\mathbf{q}}^T M \dot{\mathbf{q}} - V(\mathbf{q})$ e $F = F(\dot{\mathbf{q}})$, deriva-se o integrador [18]

$$\frac{1}{h}(-q_{k+2} + 2q_{k+1} - q_k) + \frac{h}{2}(1 - \alpha)a_{k+1+\alpha} + \frac{h}{2}\alpha a_{k+2-\alpha} + \frac{h}{2}\alpha a_{k+\alpha} + \frac{h}{2}(1 - \alpha)a_{k+1-\alpha} + \frac{h}{2}f\left(\frac{q_{k+2} - q_{k+1}}{h}\right) + \frac{h}{2}f\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h}\right) = 0,$$

onde $a_k = M^{-1}(-\nabla V(q_k))$.

Tal como no caso contínuo, se a força lagrangiana $f_L : TQ \rightarrow T^*Q$ satisfizer

$$\langle f_L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}), (\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \rangle < 0,$$

para todo o $(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \in TQ$, ela tem natureza dissipativa. Seja $E_L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$ a energia do sistema. Calculando a evolução temporal de E_L ao longo da solução das equações de Euler-Lagrange forçadas, mostra-se que [27]

$$\frac{d}{dt}E_L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) = f_L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) \cdot \dot{\mathbf{q}}(t),$$

ou seja, as forças dizem-se dissipativas se a energia do sistema decrescer. No caso de $f_L \cdot \dot{\mathbf{q}} \leq 0$, as forças dizem-se fracamente dissipativas.

Se as forças forem ortogonais à acção do grupo, ou seja, $\langle f_d, \xi_{Q \times Q} \rangle = 0$ para todo o $\xi \in \mathfrak{g}$, as duas funções quantidades de movimento lagrangianas discretas coincidem [27].

Represente-se esta função por $J_{L_d}^f : Q \times Q \rightarrow \mathfrak{g}^*$.

Teorema 4.3 (Teorema de Noether forçado discreto). *Considere-se um sistema lagrangiano discreto $L_d : Q \times Q \rightarrow \mathbb{R}$ com forças discretas $f_d^+, f_d^- : Q \times Q \rightarrow T^*Q$ e uma acção simétrica $\Phi : G \times Q \rightarrow Q$, tal que $\langle f_d, \xi_{Q \times Q} \rangle = 0$ para todo o $\xi \in \mathfrak{g}$. Então, a função quantidade de movimento lagrangiana discreta $J_{L_d}^f : Q \times Q \rightarrow \mathfrak{g}^*$ é preservada pelo fluxo lagrangiano discreto, ou seja, $J_{L_d}^f \circ \psi_{L_d} = J_{L_d}^f$.*

Note-se que, tal como no caso contínuo, a 2-forma discreta não é preservada em sistemas forçados.

4.4 Sistemas discretos com restrições

Considere-se um sistema lagrangiano discreto $L_d : Q \times Q \rightarrow \mathbb{R}$, com a restrição holónoma $\phi : Q \rightarrow \mathbb{R}^d$ e a correspondente subvariedade $N = \phi^{-1}(0) \subset Q$. Como $N \times N$ é uma subvariedade de $Q \times Q$, pode restringir-se a Lagrangiana discreta a $L_d^N = L_d|_{N \times N}$, a fim de obter um sistema lagrangiano discreto em $N \times N$. As equações de Euler-Lagrange discretas têm uma versão para sistemas com restrições [27, 39]; demonstra-se o teorema seguinte [27].

Teorema 4.4. *Dado um sistema lagrangiano discreto $L_d : Q \times Q \rightarrow \mathbb{R}$, com a restrição holónoma $\phi : Q \rightarrow \mathbb{R}^d$, faça-se $N = \phi^{-1}(0) \subset Q$ e $L_d^N = L_d|_{N \times N}$. Então, o que se segue é equivalente:*

1. $q_d = \{q_k\}_{k=0}^N \in C_d(N)$ extremiza $A_d^N = A_d|_{N \times N}$ e, então, resolve as equações de Euler-Lagrange discretas para L_d^N .
2. $q_d = \{q_k\}_{k=0}^N \in C_d(Q)$ e $\lambda_d = \{\lambda_k\}_{k=1}^{N-1} \in C_d(\mathbb{R}^d)$ satisfaz as equações de Euler-Lagrange discretas com restrições

$$\begin{aligned} D_2 L_d(q_{k-1}, q_k) + D_1 L_d(q_k, q_{k+1}) &= \langle \lambda_k, \nabla \phi(q_k) \rangle, \\ \phi(q_k) &= 0. \end{aligned} \tag{4.28}$$

3. $(q_d, \lambda_d) = \{(q_k, \lambda_k)\}_{k=0}^N \in C_d(Q \times \mathbb{R}^d)$ extremiza $\bar{A}_d(q_d, \lambda_d) = A_d(q_d) - \langle \lambda_d, \Phi_d \rangle_{l_2}$, e então, resolve as equações de Euler-Lagrange discretas para ambas as Lagrangianas discretas aumentadas $\bar{L}_d^+, \bar{L}_d^- : (Q \times \mathbb{R}^d) \times (Q \times \mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}$ definidos por

$$\begin{aligned} \bar{L}_d^+(q_k, \lambda_k, q_{k+1}, \lambda_{k+1}) &= L_d(q_k, q_{k+1}) - \langle \lambda_{k+1}, \phi(q_{k+1}) \rangle, \\ \bar{L}_d^-(q_k, \lambda_k, q_{k+1}, \lambda_{k+1}) &= L_d(q_k, q_{k+1}) - \langle \lambda_k, \phi(q_k) \rangle, \end{aligned}$$

onde a função $\Phi : C_d(Q) \rightarrow C_d(\mathbb{R}^d)$ é definida por $\Phi_d(q_d)(kh) = \phi(q_d(kh)) = \phi(q_k)$.

Agora, defina-se a função Hamiltoniana discreta $\psi_{\bar{L}_d^-} : (q_0, \lambda_0, p_0, \pi_0) \mapsto (q_1, \lambda_1, p_1, \pi_1)$ como

$$\begin{aligned} p_0 &= -D_1 L_d(q_0, q_1) + \langle \lambda_0, \nabla \phi(q_0) \rangle, \\ \pi_0 &= \phi(q_0), \\ p_1 &= D_2 L_d(q_0, q_1), \\ \pi_1 &= 0. \end{aligned} \tag{4.29}$$

Estas equações, juntamente com a condição $\phi(q_k) = 0$, são equivalentes às equações de Euler-Lagrange discretas com restrições (4.28), ou seja, são equivalentes ao ponto (2) do teorema (4.4).

Note-se que λ_0 não é uma condição inicial livre, mas será determinada por (q_0, p_0) . Um sistema lagrangiano discreto com restrições preserva a 2-forma simpléctica discreta.

Se a acção de um grupo for uma simetria da Lagrangiana, então as funções quantidades de movimento coincidem e o teorema de Noether é válido num sistema com restrições.

4.5 Sistemas discretos forçados com restrições

Os sistemas discretos forçados com restrições são uma combinação dos sistemas discretos forçados com os sistemas discretos com restrições. Demonstra-se o teorema seguinte [27].

Teorema 4.5. *Dado a Lagrangiana discreta $L_d : Q \times Q \rightarrow \mathbb{R}$, com forças lagrangianas discretas $f_d^+, f_d^- : Q \times Q \rightarrow T^*Q$, e restrição holónoma $\phi : Q \rightarrow \mathbb{R}^d$, faça-se $N = \phi^{-1}(0) \subset Q$, $f_d^{N\pm} = T^*i \circ f_d^\pm \circ i^{N \times N}$ e $L_d^N = L_d|_{Q \times Q}$. Então, o que se segue é equivalente.*

1. $q_d = \{q_k\}_{k=0}^N \in C_d(N)$ satisfaz o princípio de Lagrange-d'Alembert discreto para L_d^N, f_d^{N+} e f_d^{N-} e, por isso, resolve as equações de Euler-Lagrange forçadas discretas.
2. $q_d = \{q_k\}_{k=0}^N \in C_d(Q)$ e $\lambda_d = \{\lambda_k\}_{k=1}^{N-1} \in C_d(\mathbb{R}^d)$ satisfazem as equações de Euler-Lagrange forçadas discretas com restrições

$$\begin{aligned} D_2 L_d(q_{k-1}, q_k) + D_1 L_d(q_k, q_{k+1}) + f_d^+(q_{k-1}, q_k) + f_d^-(q_k, q_{k+1}) &= \langle \lambda_k, \nabla \phi(q_k) \rangle, \\ \phi(q_k) &= 0. \end{aligned} \tag{4.30}$$

3. $(q_d, \lambda_d) = \{(q_k, \lambda_k)\}_{k=0}^N \in C_d(Q \times \mathbb{R}^d)$ satisfaz o princípio de Lagrange-d'Alembert discreto e, por isso, resolve as equações de Euler-Lagrange forçadas discretas, para $\bar{L}_d^+, \bar{L}_d^- : (Q \times \mathbb{R}^d) \times (Q \times \mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}$ definidas por

$$\begin{aligned} \bar{L}_d^+(q_k, \lambda_k, q_{k+1}, \lambda_{k+1}) &= L_d(q_k, q_{k+1}) - \langle \lambda_{k+1}, \phi(q_{k+1}) \rangle, \\ \bar{L}_d^-(q_k, \lambda_k, q_{k+1}, \lambda_{k+1}) &= L_d(q_k, q_{k+1}) - \langle \lambda_k, \phi(q_k) \rangle, \end{aligned}$$

com forças lagrangianas discretas $\bar{f}_d^+, \bar{f}_d^- : (Q \times \mathbb{R}^d) \times (Q \times \mathbb{R}^d)$, definidas por

$$\begin{aligned}\bar{f}_d^+(q_k, \lambda_k, q_{k+1}, \lambda_{k+1}) &= \pi_Q^* \circ f_d^+(q_k, q_{k+1}), \\ \bar{f}_d^-(q_k, \lambda_k, q_{k+1}, \lambda_{k+1}) &= \pi_Q^* \circ f_d^-(q_k, q_{k+1}),\end{aligned}$$

onde $\pi_Q : Q \times \mathbb{R}^d \rightarrow Q$ representa a projecção.

A função Hamiltoniana forçada aumentada $\psi_{\bar{L}_d^-} : (q_0, \lambda_0, p_0, \pi_0) \mapsto (q_1, \lambda_1, p_1, \pi_1)$ é definida por

$$\begin{aligned}p_0 &= -D_1 L_d(q_0, q_1) - f_d^-(q_0, q_1) + \langle \lambda_0, \nabla \phi(q_0) \rangle, \\ \pi_0 &= \phi(q_0), \\ p_1 &= D_2 L_d(q_0, q_1) + f_d^+(q_0, q_1), \\ \pi_1 &= 0.\end{aligned}\tag{4.31}$$

Estas equações, juntamente com a condição $\phi(q_k) = 0$, são equivalentes às equações de Euler-Lagrange forçadas discretas com restrições (4.30).

Tal como no caso contínuo, os termos devidos às restrições entram na equação do movimento, da mesma forma que os termos devidos à força; por este motivo, os termos relativos às restrições podem ser perspectivados como forças (têm o efeito de forçar a trajectória discreta na subvariedade N).

O teorema de Noether discreto também tem uma versão forçada com restrições. Em geral, o teorema de Noether não é válido em presença de forças, excepto no caso das forças serem ortogonais à acção do grupo. Ora, no caso de sistemas forçados com restrições, tal é possível se as forças restritas à subvariedade N , f_d^N forem ortogonais à acção do grupo; mas, se f_d for ortogonal a $\xi_{Q \times Q}$, ou seja, $\langle f_d, \xi_{Q \times Q} \rangle$, então f_d^N será ortogonal a $\xi_{N \times N}$.

Teorema 4.6 (Teorema de Noether discreto forçado com restrições). *Considere-se a Lagrangiana discreta $L_d : Q \times Q \rightarrow \mathbb{R}$ na subvariedade $N \subset Q$, as forças discretas $f_d^+, f_d^- : Q \times Q \rightarrow T^*Q$ e a acção simétrica $\Phi : G \times Q \rightarrow Q$ tal que $\langle f_d, \xi_{Q \times Q} \rangle$ para todo o $\xi \in \mathfrak{g}$. Então, a função quantidade de movimento lagrangiana discreta com restrições $J_{L_d^N}^f : N \times N \rightarrow \mathfrak{g}^*$ é preservada pelo fluxo do sistema.*

4.6 A análise *backward* do erro

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

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y}) \quad (4.32)$$

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

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + h^2\mathbf{F}_3(\mathbf{y}) + \dots, \quad (4.33)$$

tal que o fluxo exacto $\tilde{\psi}_h(\mathbf{y})$ de (4.33) seja igual ao fluxo numérico $\Phi_h(\mathbf{y})$. A série (4.33), em geral, não converge, sendo necessário recorrer ao teorema que se segue [12].

Teorema 4.7. *Considere-se (4.32) com um campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{y})$ infinitamente diferenciável, e assumase que o método numérico admite uma expansão em série de Taylor da forma*

$$\Phi_h(\mathbf{y}) = \mathbf{y} + h\mathbf{F}(\mathbf{y}) + h^2\mathbf{D}_2(\mathbf{y}) + h^3\mathbf{D}_3(\mathbf{y}) + \dots, \quad (4.34)$$

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

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

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

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + \dots + h^{N-1}\mathbf{F}_N(\mathbf{y}). \quad (4.35)$$

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

Teorema 4.8. *Seja $\mathbf{F}(\mathbf{y})$ analítica em $B_{2R}(\mathbf{y}_0)$ e sejam os coeficientes $\mathbf{D}_j(\mathbf{y})$ do método (4.34) analíticos em $B_R(\mathbf{y}_0)$. Assumase que*

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{y})\| \leq M \quad e \quad \|\mathbf{D}_j(\mathbf{y})\| \leq \mu M \left(\frac{2\kappa M}{R} \right)^{j-1} \quad (4.36)$$

para todo $\mathbf{y} \in B_{2R}(\mathbf{y}_0)$ e $\mathbf{y} \in B_R(\mathbf{y}_0)$, respectivamente. Se $h \leq h_0/4$, com $h_0 = R/(e\eta M)$ e $\eta = 2 \max(\kappa, \mu/(2 \ln 2 - 1))$, então existe $N = N(h)$, nomeadamente o maior inteiro que

satisfaz $hN \leq h_0$, tal que a diferença entre a solução numérica $\mathbf{y}_1 = \Phi_h(\mathbf{y}_0)$ e a solução exacta $\tilde{\psi}_{N,t}(\mathbf{y}_0)$ da equação modificada truncada (4.35) satisfaz

$$\|\Phi_h(\mathbf{y}_0) - \tilde{\psi}_{N,h}(\mathbf{y}_0)\| \leq h\gamma M e^{-h_0/h}, \quad (4.37)$$

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

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

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

O facto de que a aplicação de métodos simplécticos origina equações modificadas hamiltonianas é um caso particular das propriedades geométricas da análise *backward* do erro. Tal significa que, no contexto da equação diferencial (4.32), se \mathbf{F} pertencer a uma certa classe de campos vectoriais (por exemplo, preservam algum integral) e o método numérico preservar esse integral, então o campo vectorial modificado também estará na mesma classe de \mathbf{F} [33].

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

$$\tilde{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + h^r H_{r+1}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + h^{r+1} H_{r+2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \dots + h^{N-1} H_N(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (4.38)$$

A quase conservação da Hamiltoniana decorrente da aplicação de integradores simplécticos é demonstrada pela junção da expressão (4.38) e do teorema (4.8), por concluir que $\|\tilde{H}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}^n) - \tilde{H}(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}^0)\|$ é limitado em períodos de tempo exponencialmente longos [11].

4.7 Os integradores geométricos

Nesta secção consideram-se integradores considerados convencionais, indicando-se as suas propriedades geométricas, em particular, em que condições são simplécticos, e se têm natureza variacional. A importância da natureza variacional decorre de dois resultados: se

o integrador é variacional, então ele preserva a 2-forma simpléctica e preserva a função quantidade de movimento [39].

Os métodos considerados são os métodos de Euler, a família Runge-Kutta, o método Störmer-Verlet e o método Newmark; para sistemas com restrições, abordam-se os métodos SHAKE e RATTLE.

No caso do método Newmark, mostra-se como usá-lo em sistemas dissipativos [18].

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

4.7.1 Os métodos de Euler simplécticos

Natureza simpléctica

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

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_n - h \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_{n+1}, \mathbf{q}^n), \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_{n+1}, \mathbf{q}^n).\end{aligned}\tag{4.39}$$

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

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

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

de acordo com a definição (2.20) de simplecticidade.

O seu método adjunto

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_n - h \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}^{n+1}), \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}^{n+1})\end{aligned}\tag{4.40}$$

também é simplético. Pode provar-se a simplecticidade destes dois métodos por recorrer às formas diferenciais, nomeadamente que [20]

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

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

Análise *backward* do erro

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

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

e com as equações de movimento

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

Considere-se o método de Euler simplético (4.39). Desenvolvendo a solução exacta $\tilde{\psi}_h(y)$ de (4.33) em potências de h e comparando-a com o fluxo numérico, obtêm-se relações de recorrência para as funções $F_j(y)$. No caso do pêndulo, resulta

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

sistema com natureza hamiltoniana, com

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

Conservação de invariantes

Os métodos de Euler simpléticos preservam qualquer invariante da forma [20]

$$I = \mathbf{q}^T A \mathbf{p} + \mathbf{b}^T \mathbf{z}, \quad (4.41)$$

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

Extensão a sistemas com restrições

O método de Euler simplético em sistemas com restrições, constituído pelas equações (3.11) e (3.13)[13]:

- (i) é convergente de ordem 1;
- (ii) não é simétrico;
- (iii) é simplético, já que é definido pela composição de duas transformações simpléticas. A primeira função $(p_n, q^n) \mapsto (\hat{p}_{n+1}, q^{n+1})$ é definida por (3.11), considerando-se λ_{n+1} como função de $\lambda(p_n, q^n)$. A segunda função é $(\hat{p}_{n+1}, q^{n+1}) \mapsto (p_{n+1}, q^{n+1})$, definida por (3.13).

4.7.2 A regra do ponto médio implícita

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

Natureza simplética

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

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + hJ^{-1}\nabla H\left(\frac{\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n}{2}\right). \quad (4.42)$$

(4.42) é um método simplético de ordem 2 [6, 13]. Diferenciando a equação (4.42), vem

$$\frac{\partial \mathbf{y}_{n+1}}{\partial \mathbf{y}} = \left(I - \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \left(\frac{\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n}{2} \right) \right)^{-1} \left(I + \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \left(\frac{\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n}{2} \right) \right), \quad (4.43)$$

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

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

é igual a

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

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

Pode demonstra-se que a regra do ponto médio implícita é um integrador simpléctico por recorrer às formas diferenciais - aliás, como na demonstração só se exige que a matriz J seja constante, invertível e anti-simétrica, pode afirmar-se que este integrador preserva qualquer estrutura simpléctica constante [20].

Natureza variacional

Dado um sistema hamiltoniano $H : T^*Q \rightarrow \mathbb{R}$, a regra do ponto médio é um integrador $\psi_h : (q_0, p_0) \mapsto (q_1, p_1)$ com natureza variacional [27]. ψ_h é definida por

$$\frac{q_1 - q_0}{h} = \frac{\partial H}{\partial p} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{p_1 + p_0}{2} \right), \quad (4.44)$$

$$\frac{p_1 - p_0}{h} = -\frac{\partial H}{\partial q} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{p_1 + p_0}{2} \right). \quad (4.45)$$

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

$$L_d(q_0, q_1, h) = hL \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right). \quad (4.46)$$

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

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

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

Adicionando e subtraindo estas duas expressões, obtém-se

$$\frac{p_1 + p_0}{2} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right), \quad (4.47)$$

$$\frac{p_1 - p_0}{h} = \frac{\partial L}{\partial q} \left(\frac{q_1 + q_0}{2}, \frac{q_1 - q_0}{h} \right). \quad (4.48)$$

Apelando à transformação de Legendre, pode dizer-se que a equação (4.47) significa

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

e então, por um lado, como $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}}$, a equação (4.48) corresponde à equação (4.45) e, por outro lado, a mesma equação (4.48), conjugada com a igualdade $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = \dot{\mathbf{q}}$, origina (4.44).

Por fim, note-se que a Lagrangiana (4.46) é um caso particular da Lagrangiana (4.6)

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

onde $\alpha \in [0, 1]$. Para qualquer valor de α , obtêm-se sempre integradores implícitos. Quando $\alpha = \frac{1}{2}$, obtêm-se a Lagrangiana (4.46), único valor de α para o qual L_d é simétrica e de segunda ordem. Para outros valores de α , obtêm-se integradores de ordem 1.

A regra do ponto médio também pode ser obtida por intermédio da Lagrangiana discreta (4.9), ou seja, $L_d = L_d^{sim,\alpha}$, para $\alpha = \frac{1}{2}$ [18]. O algoritmo (4.17), para esta escolha de α , pode ser escrito como

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

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

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

$$L_d^{trap,\alpha}(q_0, q_1, h) = h(1 - \alpha)L \left(q_0, \frac{q_1 - q_0}{h} \right) + h\alpha L \left(q_1, \frac{q_1 - q_0}{h} \right). \quad (4.49)$$

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

Conservação de invariantes

A regra do ponto médio implícita preserva exactamente qualquer invariante quadrático da forma [20]

$$I = \frac{\mathbf{z}^T A \mathbf{z}}{2} + \mathbf{b}^T \mathbf{z}, \quad (4.50)$$

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

4.7.3 Métodos Runge-Kutta simplécticos

Natureza simpléctica

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

Métodos Runge-Kutta explícitos e simplécticos são usados no caso de Hamiltonianãs separáveis e os implícitos para as não separáveis. Os métodos Runge-Kutta Gauss-Legendre são os mais adequados para sistemas hamiltonianos gerais porque, embora sejam implícitos e, por isso, de implementação mais pesada [14, 29]:

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

(iv) são simplécticos para sistemas hamiltonianos canónicos.

Embora os métodos simplécticos sejam preferíveis na integração de sistemas hamiltonianos, note-se que eles não são perfeitos; por exemplo, mesmo implementando um Gauss-Legendre na integração de sistemas hamiltonianos, não se consegue a conservação da energia. No entanto, na maioria das aplicações, opta-se pela preservação da estrutura hamiltoniana, ao invés da conservação da energia.

Considere-se o método Runge-Kutta com tabela

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

Aplicando-o ao sistema hamiltoniano (2.5), obtêm-se as equações

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_i &= \mathbf{p}_n + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}^j, t_n + c_j h) \\ \mathbf{Q}^i &= \mathbf{q}^n + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \mathbf{g}(\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}^j, t_n + c_j h) \\ \mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_n + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{f}(\mathbf{P}_i, \mathbf{Q}^i, t_n + c_i) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{g}(\mathbf{P}_i, \mathbf{Q}^i, t_n + c_i h), \end{aligned} \tag{4.51}$$

onde \mathbf{f} e \mathbf{g} representam, respectivamente, os d -vectores com componentes $-\partial H/\partial q^i$ e $\partial H/\partial p_i$; \mathbf{P}_i e \mathbf{Q}^i são as etapas intermédias correspondentes às variáveis \mathbf{p} e \mathbf{q} , respectivamente. Demonstra o teorema seguinte [34].

Teorema 4.9. *Se os coeficientes de um método Runge-Kutta verificarem as relações*

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad i, j = 1, \dots, \nu, \tag{4.52}$$

então o método é simpléctico.

Um exemplo de métodos Runge-Kutta simplécticos são os de Gauss-Legendre. Todos os métodos Runge-Kutta simplécticos são implícitos, o que decorre de fazer $i = j$ em (4.52)

e exigir a consistência do método.

Devido à simetria, a validade de (4.52) é garantida se

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0,$$

se verificar para $i \leq j$. No entanto, não existe nenhuma relação entre a simetria e a symplecticidade de um método Runge-Kutta. Por exemplo, a regra do ponto médio (3.6) é simétrica e simpléctica; o método de Euler explícito não é nem simétrico e nem simpléctico. É possível construir algoritmos de 2 etapas simétricos mas não simplécticos ou, então, simplécticos mas não simétricos.

Leis de conservação

O teorema (2.2) mostra que, em problemas hamiltonianos autónomos, a Hamiltoniana é uma quantidade conservada. Será que os métodos Runge-Kutta também conservam a Hamiltoniana? Ou, em termos mais abrangentes, se I for uma quantidade conservada por um sistema hamiltoniano autónomo, será que I também é conservada por métodos desta natureza? Todos os métodos Runge-Kutta conservam invariantes lineares [13]. Quando I é quadrático, utiliza-se o resultado seguinte [34].

Teorema 4.10. *Admita-se que $I(\mathbf{y}) = \frac{1}{2}\mathbf{y}^T S \mathbf{y}$, onde S é uma matriz simétrica constante, é uma quantidade conservada por um sistema autónomo $\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{y}, t)$, não necessariamente hamiltoniano. Então, I também é conservado quando o sistema é integrado por um método Runge-Kutta simpléctico, ou seja, $I(\mathbf{y}) = \frac{1}{2}\mathbf{y}^{nT} S \mathbf{y}^n$ não varia com n .*

Este teorema (4.10) implica que, se um sistema autónomo linear com Hamiltoniana quadrática for integrado por um método Runge-Kutta simpléctico, então H será exactamente conservado ao longo das trajectórias numéricas.

Os integrais lineares e quadráticos são preservados pelos métodos Runge-Kutta simplécticos [30]. No entanto, por exemplo, para preservar um integral cúbico, tem de se fazer a escolha entre a preservação da estrutura simpléctica e a preservação do integral.

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

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

Simetria

Em que situação é que os métodos Runge-Kutta são simétricos? Demonstra-se o teorema que se segue [13, 30].

Teorema 4.11. *O método adjunto de um método Runge-Kutta com ν -etapas,*

$$k_i = f \left(t_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} k_j \right), \quad i = 1, \dots, \nu \quad (4.53)$$

$$y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i k_i,$$

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

$$a_{ij}^* = b_{\nu+1-j} - a_{\nu+1-i, \nu+1-j}, \quad b_i^* = b_{\nu+1-i}. \quad (4.54)$$

Se

$$a_{\nu+1-i, \nu+1-j} + a_{ij} = b_j, \quad (4.55)$$

para todo o i, j , então o método Runge-Kutta (4.53) é simétrico.

Nenhum método Runge-Kutta explícito pode ser simétrico, pois, para $i = j$, não satisfazem a equação (4.55). Nos métodos Runge-Kutta implícitos diagonais, onde $a_{ij} = 0$ para $i < j$ e elementos da diagonal não nulos, a condição (4.55) vem

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

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

4.7.4 Métodos Runge-Kutta particionados

Natureza simpléctica

Considere-se uma Hamiltoniana do tipo

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}), \quad (4.56)$$

designado por Hamiltoniana separável. Neste caso, as equações de Hamilton assumem a forma particionada (3.59), com

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

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

Prova-se o teorema que se segue [34].

Teorema 4.12. *Se os coeficientes de um método Runge-Kutta particionado verificarem as relações*

$$b_i A_{ij} + B_j a_{ji} - b_i B_j = 0, \quad i, j = 1, \dots, \nu, \quad (4.57)$$

então o método, quando aplicado a um problema hamiltoniano com Hamiltoniana separável (4.56), é simpléctico.

No caso mais geral das equações (3.33), deve acrescentar-se a equação [13]

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

Natureza variacional

Considere-se o método Runge-Kutta particionado

$$\begin{aligned} p_1 &= p_0 + h \sum_{i=1}^{\nu} B_i \dot{P}_i \\ q^1 &= q^0 + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \dot{Q}^i \\ P_1 &= p_0 + h \sum_{j=1}^{\nu} A_{ij} \dot{P}_j \\ Q^i &= q^0 + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \dot{Q}^j, \end{aligned} \quad (4.58)$$

onde $\dot{P}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(P_i, Q^i)$, $\dot{Q}^i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(P_i, Q^i)$, com Hamiltoniana $H = \mathbf{p}^T \dot{\mathbf{q}} - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$. Se o método for simplético, então é válido o teorema que se segue [13, 27].

Teorema 4.13. *O integrador variacional com Lagrangiana discreta*

$$L_h(q^0, q^1) = h \sum_{i=1}^{\nu} b_i L(Q^i, \dot{Q}^i) \quad (4.59)$$

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

Leis de conservação

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

O análogo do teorema (4.10) para métodos Runge-Kutta particionados assume a forma seguinte.

Teorema 4.14. *Admita-se que $I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T S \mathbf{q}$, onde S é uma matriz constante, é uma quantidade conservada de um sistema autónomo particionado (3.59), não necessariamente hamiltoniano. Então, I também é uma quantidade conservada quando o sistema é integrado por um método Runge-Kutta particionado simplético, ou seja, $I(\mathbf{p}^n, \mathbf{q}^n)$ não varia com n .*

No caso dos métodos Runge-Kutta particionados simpléticos, mesmo que se assuma a linearidade do sistema a integrar, tal não significa, em geral, a conservação da Hamiltoniana: $I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T S \mathbf{q}$ não é a expressão quadrática mais geral nas variáveis \mathbf{p} e \mathbf{q} .

Simetria

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

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

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

Teorema 4.15. *Se os coeficientes de ambos os métodos Runge-Kutta, b_i, a_{ij} e B_i, A_{ij} satisfizerem a condição (4.55), então o método*

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

é simétrico.

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

4.7.5 Métodos Runge-Kutta-Nyström

Formulação

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

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T M^{-1} \mathbf{p} + V(\mathbf{q}). \quad (4.60)$$

Note-se que a Hamiltoniana pode ser separável, mas não da forma (4.60) - por exemplo, o movimento relativista de um sistema de pontos de massa. No caso (4.60), as equações do movimento são

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{f}(\mathbf{q}) = \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}, \quad \dot{\mathbf{q}} = M^{-1} \mathbf{p}, \quad (4.61)$$

ou, eliminando \mathbf{p}

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

sistema que pode ser integrado por um método Runge-Kutta particionado. Reescrevendo as equações (3.38) em termos das variáveis \mathbf{p} e \mathbf{q} , obtém-se a seguinte expressão para os

estágios

$$\mathbf{Q}^i = \mathbf{q}^n + h\gamma_i M^{-1} \mathbf{p}_n + h^2 \sum_{j=1}^{\nu} \alpha_{ij} M^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{Q}^j, t_n + \gamma_j h); \quad (4.62)$$

as aproximações são dadas por

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_n + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i \mathbf{f}(\mathbf{Q}^i, t_n + \gamma_i h) \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + hM^{-1} \mathbf{p}_n + h^2 \sum_{i=1}^{\nu} \beta_i M^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{Q}^i, t_n + \gamma_i h). \end{aligned} \quad (4.63)$$

Natureza variacional

Os métodos de Runge-Kutta explícitos particionados simpléticos são variacionais, pelo menos para Hamiltonianas cuja energia cinética é da forma $T = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T M^{-1} \mathbf{p}$, para alguma matriz de massa M constante [27].

Natureza simplética

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

Teorema 4.16. *Admita-se que os coeficientes (3.36) do método de Runge-Kutta-Nyström satisfazem*

$$\begin{aligned} \beta_i &= b_i(1 - \gamma_i), & i &= 1, \dots, \nu, \\ b_i(\beta_j - \alpha_{ij}) &= b_j(\beta_i - \alpha_{ji}), & i, j &= 1, \dots, \nu. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Então, o método, quando aplicado a problemas hamiltonianos com Hamiltoniana da forma (4.60) é simplético.

Leis de conservação

O análogo do teorema (4.14) é dado pelo teorema seguinte.

Teorema 4.17. *Admita-se que $I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T S \mathbf{q}$, onde S é uma matriz constante, é uma quantidade conservada de um sistema autónomo particionado (3.59), não necessariamente*

hamiltoniano. Então, I também é uma quantidade conservada quando o sistema é integrado por um método Runge-Kutta Nyström simpléctico, ou seja, $I(\mathbf{p}^n, \mathbf{q}^n)$ não varia com n .

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

4.7.6 O método Störmer-Verlet

Natureza variacional

O método Störmer-Verlet é um método variacional [25, 27]. Admita-se que a Lagrangiana do sistema é dado pela diferença entre a energia cinética e a energia potencial

$$L(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}^T M \dot{\mathbf{q}} - V(\mathbf{q}), \quad (4.65)$$

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

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

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

$$L_h(q_n, q_{n+1}) = \frac{h}{2} L \left(q_n, \frac{q_{n+1} - q_n}{h} \right) + \frac{h}{2} L \left(q_{n+1}, \frac{q_{n+1} - q_n}{h} \right) \quad (4.66)$$

obtêm-se as equações de Euler-Lagrange discretas

$$M(q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1}) + h^2 \nabla V(q_n) = 0, \quad (4.67)$$

expressão análoga a (3.43), para $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = -M^{-1} \nabla V(\mathbf{q})$.

Propriedades geométricas

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

1. *Simetria e reversibilidade.* O método Störmer-Verlet, quando aplicado à equação diferencial de segunda ordem (3.42), é simétrico e reversível [12].

- *Simetria.* O método Störmer-Verlet é simétrico com respeito à direcção temporal: se, nas equações (3.46), se substituir h por $-h$ e se trocar n por $n + 1$, obtém-se o mesmo método; analogamente nas equações (3.47), para as substituições $h \leftrightarrow -h$ e $n - \frac{1}{2} \leftrightarrow n + \frac{1}{2}$. Tal significa que, em termos da formulação de passo simples $\Phi_h : (\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_n) \mapsto (\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+1})$,

$$\Phi_h = \Phi_{-h}^{-1}. \quad (4.68)$$

- *Reversibilidade.* A simetria temporal do método Störmer-Verlet implica a reversibilidade. Se, no sistema (3.44), se inverter a direcção da velocidade inicial, então a trajectória solução é a mesma, mas a direcção do movimento é contrária. Neste sentido, diz-se que o fluxo ψ_t satisfaz

$$\psi_t(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\widehat{\mathbf{q}}, \widehat{\mathbf{v}}) \quad \text{implica} \quad \psi_t(\widehat{\mathbf{q}}, -\widehat{\mathbf{v}}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v}), \quad (4.69)$$

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

$$\Phi_h(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\widehat{\mathbf{q}}, \widehat{\mathbf{v}}) \quad \text{implica} \quad \Phi_h(\widehat{\mathbf{q}}, -\widehat{\mathbf{v}}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v}). \quad (4.70)$$

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

$$\rho \circ \psi_t = \psi_t^{-1} \circ \rho. \quad (4.71)$$

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

$$\rho \circ \Phi_h = \Phi_h^{-1} \circ \rho. \quad (4.72)$$

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

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{g}(\mathbf{q}, \mathbf{v}), \quad \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{f}(\mathbf{q}, \mathbf{v}). \quad (4.73)$$

Usando as equações (3.49) e (3.50) obtém-se uma extensão do método de Störmer-Verlet com o seguinte formato

$$\begin{aligned} v_{n+\frac{1}{2}} &= v_n + \frac{h}{2} f\left(q_n, v_{n+\frac{1}{2}}\right) \\ q_{n+1} &= q_n + \frac{h}{2} \left(g\left(q_n, v_{n+\frac{1}{2}}\right) + g\left(q_{n+1}, v_{n+\frac{1}{2}}\right) \right) \\ v_{n+1} &= v_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} f\left(q_{n+1}, v_{n+\frac{1}{2}}\right). \end{aligned} \quad (4.74)$$

O método Störmer-Verlet (4.74) aplicado ao sistema de equações hamiltonianas (2.5) assume a leitura

$$\begin{aligned} p_{n+\frac{1}{2}} &= p_n - \frac{h}{2} \frac{\partial H}{\partial q}\left(p_{n+\frac{1}{2}}, q_n\right) \\ q_{n+1} &= q_n + \frac{h}{2} \left(\frac{\partial H}{\partial p}\left(p_{n+\frac{1}{2}}, q_n\right) + \frac{\partial H}{\partial p}\left(p_{n+\frac{1}{2}}, q_{n+1}\right) \right) \\ p_{n+1} &= p_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2} \frac{\partial H}{\partial q}\left(p_{n+\frac{1}{2}}, q_{n+1}\right). \end{aligned} \quad (4.75)$$

No caso particular da Hamiltoniana ter a expressão

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T M^{-1} \mathbf{p} + V(\mathbf{q}), \quad (4.76)$$

onde M é a matriz das massas, com natureza definida positiva e $V(\mathbf{q})$ é o potencial, as equações (4.75) reduzem-se ao método Störmer-Verlet (3.46), com $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = -M^{-1} \nabla V(\mathbf{q})$, e fazendo $p_n = M v_n$.

A demonstração da symplecticidade do método Störmer-Verlet pode ser diversa, dependendo da interpretação dada ao método: visão do Störmer-Verlet como a composição dos métodos de Euler, ou como um método *splitting*, ou como um integrador variacional, ou então por apelar às funções geradoras [12]. O método Störmer-Verlet é simplético e de ordem 2; a demonstração apela à equação (3.52) e ao facto de as transformações simpléticas serem um grupo, em particular que, a composição de transformações simpléticas é, também, simplética [13].

3. *Preservação do volume.* O método (4.75) aplicado ao sistema (2.5) preserva o volume, consequência da symplecticidade; de facto, a equação (2.20), definição de transformação simplética, implica

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

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

Conservação dos invariantes ou primeiros integrais

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

$$I'(\mathbf{y})\mathbf{F}(\mathbf{y}) = 0, \quad \text{para todo o } \mathbf{y}, \quad (4.77)$$

o que significa que o gradiente $\nabla I(\mathbf{y})$ é ortogonal ao campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{y})$, em todo o ponto do espaço de fase. Os teoremas (4.18) e (4.19) indicam que tipos de invariantes são preservados pelo método Störmer-Verlet [12].

Teorema 4.18. *O método Störmer-Verlet preserva os primeiros integrais lineares.*

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

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^T M^{-1}\mathbf{p} + V(\mathbf{q}) \quad (4.78)$$

com Lagrangiana associada da forma

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

$a(\mathbf{q})$ deve ser linear. Consequentemente, para sistemas hamiltonianos (2.5) com Hamiltoniana (4.78), todos os primeiros integrais que se originam do teorema de Noether são preservados pelo método de Störmer-Verlet.

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

Teorema 4.19. *O método Störmer-Verlet preserva os primeiros integrais quadráticos da forma*

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

ou

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

no caso hamiltoniano.

O teorema (4.19) pode ser utilizado para provar, de forma alternativa, a simplectividade do método Störmer-Verlet [12].

Equação modificada do método Störmer-Verlet

Fazendo $\mathbf{y} = (q, v)^T$ e $\mathbf{F}(\mathbf{y}) = (v, f(q))^T$, a equação diferencial (3.44) assume a forma de (4.32). Para o método Störmer-Verlet (3.46), tem-se

$$\Phi_h(q, v) = \begin{pmatrix} q + hv + \frac{h^2}{2} f(q) \\ v + \frac{h}{2} f(q) + \frac{h}{2} f(q + hv + \frac{h^2}{2} f(q)) \end{pmatrix}. \quad (4.79)$$

Expandindo esta função em série de Taylor, obtém-se (4.34), com

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

sendo as funções $\mathbf{F}_j(q, v)$ construídas pelas relações de recorrência [12]

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_2(\mathbf{y}) &= \mathbf{D}_2(\mathbf{y}) - \frac{1}{2!} \mathbf{F}'\mathbf{F}(\mathbf{y}) \\ \mathbf{F}_3(\mathbf{y}) &= \mathbf{D}_3(\mathbf{y}) - \frac{1}{3!} (\mathbf{F}''(\mathbf{F}, \mathbf{F})(\mathbf{y}) + \mathbf{F}'\mathbf{F}'\mathbf{F}(\mathbf{y})) - \frac{1}{2!} (\mathbf{F}'\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + \mathbf{F}'_2\mathbf{F}(\mathbf{y})), \end{aligned} \quad (4.80)$$

as quais definem, univocamente, as funções $\mathbf{F}_j(\mathbf{y})$. Estas expressões são consequência da comparação, em potências de h , das expressões (4.34) e (4.81)

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_h(\mathbf{y}) &= \mathbf{y} + h(\mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + h^2\mathbf{F}_3(\mathbf{y}) + \dots) \\ &\quad + \frac{h^2}{2!} (\mathbf{F}'(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}'_2(\mathbf{y}) + \dots)(\mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + \dots) + \dots \end{aligned} \quad (4.81)$$

Como o método Störmer-Verlet é de ordem 2, a função $\mathbf{D}_2(q, v)$ tem de coincidir com o coeficiente h^2 da solução exacta, e então, resulta $\mathbf{F}_2(q, v) = 0$. Aliás, demonstra-se que para métodos simétricos, a equação diferencial modificada admite uma expansão em potências ímpares de h , ou seja, [12]

$$\mathbf{F}_{2j}(\mathbf{y}) = 0, \quad j = 1, 2, \dots$$

Para $\mathbf{F}_3(q, v)$ obtém-se

$$\mathbf{F}_3(q, v) = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} -2f'(q)v \\ f'(q)f(q) + f''(q)(v, v) \end{pmatrix}. \quad (4.82)$$

Para funções $\mathbf{F}_j(q, v)$ ímpares de ordem superior, as expressões são mais pesadas e com derivadas de $f(q)$ de ordem mais elevada.

Propriedades da equação diferencial modificada

As propriedades geométricas de um método numérico têm a sua contrapartida na equação modificada. Assim, estudar as propriedades de determinado método, é equivalente a estudar as propriedades correspondentes da equação diferencial modificada. Em particular para o método Störmer-Verlet, mostra-se que [13]:

- (i) *Sistemas reversíveis.* Se o método Störmer-Verlet (3.46) for aplicado a (3.44), então, cada truncatura da equação diferencial modificada é reversível com respeito à reflexão $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v})$.
- (ii) *Sistemas hamiltonianos.* Se o método Störmer-Verlet (4.75) for aplicado a um sistema hamiltoniano, então cada truncatura da equação diferencial modificada é hamiltoniana.
- (iii) *Primeiros integrais.* Se o método Störmer-Verlet (4.74) for aplicado a uma equação diferencial com um primeiro integral da forma $I(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{v}^T(C\mathbf{q} + \mathbf{c})$, então, cada truncatura da equação diferencial modificada tem $I(\mathbf{q}, \mathbf{v})$ para primeiro integral.

Comportamento assintótico das soluções numéricas

A energia total $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ de um sistema hamiltoniano não é exactamente preservada pelo método Störmer-Verlet; no entanto, a energia é conservada de forma aproximada. De facto, em sistemas hamiltonianos genéricos, a Hamiltoniana é preservada, no longo prazo, de forma aproximada.

Teorema 4.20. *A energia total ao longo da solução numérica (p_n, q_n) do método Störmer-Verlet satisfaz*

$$|H(p_n, q_n) - H(p_0, q_0)| \leq Ch^2 + C_N h^N t, \quad \text{para } 0 \leq t = nh \leq h^{-N},$$

para N inteiro positivo arbitrário. As constantes C e C_N são independentes de t e h . C_N depende dos valores extremos das derivadas de H até à ordem $N+1$ na região que contém os valores das soluções numéricas.

O teorema é demonstrado de duas formas diferentes [12]; numa delas apela-se à simplecticidade do método Störmer-Verlet, conjugando-a com a análise *backward* e, na outra, apela-se à simetria do método, conjugando-a com a análise *backward*. O contributo da análise *backward* do erro é visível em muitas demonstrações no campo da integração geométrica.

4.7.7 O método Newmark

Natureza variacional

O método Newmark é um método variacional e, por isso, goza das vantagens dos integradores variacionais: é simplético, preserva as funções quantidades de movimento e exhibe um comportamento de longo prazo relativamente à energia excelente [18].

Pode provar-se a natureza variacional do Newmark de três maneiras diferentes [18]. Numa delas, faz-se o *pullback* do algoritmo (4.17), de T^*Q para TQ , obtendo-se o algoritmo $(q_k, \dot{q}_k) \mapsto (q_{k+1}, \dot{q}_{k+1})$, dado por

$$\begin{aligned} q_{k+1} &= q_k + h\dot{q}_k + \frac{h^2}{2} [(1 - \alpha)a_{k+\alpha} + \alpha a_{k+1-\alpha}] \\ \dot{q}_{k+1} &= \dot{q}_k + h \left(\frac{1}{2}a_{k+\alpha} + \frac{1}{2}a_{k+1-\alpha} \right). \end{aligned} \quad (4.83)$$

Ora, fazendo $\alpha = 0$ ou $\alpha = 1$ neste algoritmo, ou $\beta = 0$ e $\gamma = \frac{1}{2}$ nas equações (3.53) do método Newmark, obtêm-se as mesmas equações. A demonstração mais geral da natureza variacional do integrador passa por construir uma Lagrangiana discreta L_d^β para a qual as equações de Euler-Lagrange são o próprio método Newmark, com $\gamma = \frac{1}{2}$, dado β .

Teorema 4.21. *O método Newmark, com $\gamma = \frac{1}{2}$ e qualquer β , $0 \leq \beta \leq \frac{1}{2}$, e h suficientemente pequeno, é igual às equações de Euler-Lagrange discretas, para a Lagrangiana discreta L_d^β definida por*

$$L_d^\beta(q_0, q_1) = \frac{h}{2} \left(\frac{\eta^\beta(q_1) - \eta^\beta(q_0)}{h} \right)^T M \left(\frac{\eta^\beta(q_1) - \eta^\beta(q_0)}{h} \right) - h\tilde{V}(\eta^\beta(q_0)),$$

onde $\eta^\beta(q_k) = q_k - h^2\beta M^{-1}\nabla V(q_k)$ e \tilde{V} é definido tal que $\nabla\tilde{V}(\eta^\beta(q_k)) = \nabla V(q_k)$, para todo o q_k .

Não se garante a estabilidade do método Newmark para passos temporais grandes; a *performance* do Newmark pode não ser interessante em sistemas não lineares, mesmo com h moderado. Tal é reflexo da estabilidade numérica do método, que exige h pequeno [18].

O algoritmo Newmark forçado também é de natureza variacional. O análogo forçado do teorema (4.21) assume a forma que se segue.

Teorema 4.22. *O método Newmark, com $\gamma = \frac{1}{2}$, qualquer β e h suficientemente pequeno, para um sistema forçado, é igual às equações de Euler-Lagrange discretas forçadas, para a Lagrangiana discreta L_d^β e forças discretas $f_d^{\beta-}$ e $f_d^{\beta+}$ definidas por*

$$\begin{aligned} L_d^\beta(q_0, q_1) &= \frac{h}{2} \left(\frac{\eta^\beta(q_1) - \eta^\beta(q_0)}{h} \right)^T M \left(\frac{\eta^\beta(q_1) - \eta^\beta(q_0)}{h} \right) - h\tilde{V}(\eta^\beta(q_0)), \\ f_d^{\beta-}(q_0, q_1) &= \frac{h}{2} \left[(1 - 2\beta)f_{NM}^{\beta-}(q_0, q_1) + 2\beta f_{NM}^{\beta+}(q_0, q_1) \right] D\eta^\beta(q_0), \\ f_d^{\beta+}(q_0, q_1) &= \frac{h}{2} \left[2\beta f_{NM}^{\beta-}(q_0, q_1) + (1 - 2\beta)f_{NM}^{\beta+}(q_0, q_1) \right] D\eta^\beta(q_1), \end{aligned}$$

onde $\eta^\beta(q_k) = q_k - h^2\beta M^{-1}\nabla V(q_k)$, \tilde{V} é definida tal que $\nabla\tilde{V}(\eta^\beta(q_k)) = \nabla V(q_k)$ para todo o q_k , e as funções $f_{NM}^{\beta-}$ e $f_{NM}^{\beta+}$ são definidas de acordo com (3.58).

Método de passo duplo para sistemas com fricção

A ideia básica é usar um método de integração com dois passos, separando-se o algoritmo em parte conservativa e em parte dissipativa, e em que ao segundo passo subjaz um princípio de minimização. Este género de algoritmo, baseado em métodos de optimização, é bastante útil numa grande variedade de problemas, nomeadamente, onde poupanças de armazenamento computacional são possíveis de obter através das técnicas de optimização [18].

Teorema 4.23. *Para uma Lagrangiana igual à diferença entre a energia cinética e a energia potencial, o algoritmo de passo duplo seguinte é consistente com as equações do movimento com forças dissipativas, com potencial dissipativo φ :*

1. $(q_{n-1}, q_n) \mapsto (q_n, q_{n+1}^{pred})$, através das equações de Euler-Lagrange discretas, a partir da escolha de uma dada Lagrangiana discreta L_d .

2. $(q_n, q_{n+1}^{pred}) \mapsto (q_n, q_{n+1})$, por extremizar

$$K_d(q_{n+1}, q_{n+1}^{pred}) + h\varphi\left(\frac{q_{n+1} - q_n}{h}\right),$$

onde K_d representa a energia cinética discreta, com respeito ao ponto q_{n+1} .

Considere-se o exemplo que se segue. Dados (q_0, q_1) , o cálculo de q_2^{pred} , de acordo com as equações de Euler-Lagrange discretas, para L_d^α dado por (4.6), com $\alpha = \frac{1}{2}$, é

$$M \left[\left(\frac{q_2^{pred} - 2q_1 + q_0}{h^2} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[V' \left(\frac{q_0 + q_1}{2} \right) + V' \left(\frac{q_1 + q_2^{pred}}{2} \right) \right] = 0, \quad (4.84)$$

etapa que passa pelo algoritmo Newmark. De seguida, a etapa dissipativa, que passa por minimizar a energia cinética discreta adicionada do potencial dissipativo, com respeito ao último ponto q_2 , ou seja, extremizar a expressão que se segue com respeito a q_2

$$\frac{1}{2} \left(\frac{q_2 - q_2^{pred}}{h} \right)^T M \left(\frac{q_2 - q_2^{pred}}{h} \right) + h\varphi \left(\frac{q_2 - q_1}{h} \right).$$

Tal significa que a equação satisfeita por q_2 é

$$M \left(\frac{q_2 - q_2^{pred}}{h^2} \right) + \varphi' \left(\frac{q_2 - q_1}{h} \right) = 0. \quad (4.85)$$

Adicionando as equações (4.84) e (4.85), obtém-se

$$M \left[\left(\frac{q_2 - 2q_1 + q_0}{h^2} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[V' \left(\frac{q_0 + q_1}{2} \right) + V' \left(\frac{q_1 + q_2^{pred}}{2} \right) \right] + \varphi' \left(\frac{q_2 - q_1}{h} \right) = 0,$$

o qual é consistente com as equações originais.

4.7.8 SHAKE e RATTLE

Os métodos Störmer-Verlet, velocidade de Verlet, SHAKE e RATTLE são derivados da Lagrangiana discreta (4.66) [27]. Consequentemente, têm todos natureza variacional e, por isso, conservam a estrutura simpléctica e as funções quantidade de movimento. De acordo com a derivação variacional dos algoritmos,

- (i) o Störmer-Verlet corresponde à função $\psi_{L_d} : Q \times Q \rightarrow Q \times Q$;

- (ii) o velocidade de Verlet corresponde à função $\psi_{H_d} : T^*Q \rightarrow T^*Q$;
- (iii) o SHAKE é a versão num contexto de restrições do Störmer-Verlet, ou seja, corresponde à função $\psi_{L_d^N} : N \times N \rightarrow N \times N$;
- (iv) o RATTLE é a versão num contexto de restrições do velocidade de Verlet, ou seja, corresponde à função $\psi_{H_d^N} : T^*N \rightarrow T^*N$.

O algoritmo RATTLE, definido pelas equações (3.65) e (3.66), é simplético [19].

O algoritmo RATTLE, definido pelas equações (3.67) é [13]:

- (i) simétrico;
- (ii) simplético;
- (iii) convergente de ordem 2.

Os algoritmos SHAKE e RATTLE são equivalentes, no sentido de que produzem soluções idênticas para as posições nos pontos da malha e para as velocidades nos pontos intermédios da malha [21]. Ambos os métodos preservam o produto *wedge*, embora o algoritmo SHAKE não seja, em termos rigorosos, simplético, já que as velocidades nos pontos da malha não são tangentes a

$$\mathcal{M} = \{\mathbf{q} \in \mathbb{R}^d : g_i(\mathbf{q}) = 0, \quad i = 1, \dots, m\}. \quad (4.86)$$

O algoritmo SHAKE pode ser olhado como uma função em (4.86), mas não define uma função em $T\mathcal{M}$, o espaço de todos os pares (\mathbf{q}, \mathbf{v}) , com \mathbf{q} em \mathcal{M} e \mathbf{v} em $T_{\mathbf{q}}\mathcal{M}$, onde

$$T_{\mathbf{q}}\mathcal{M} = \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^d : \frac{\partial g_i(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \cdot \mathbf{v} = 0, \quad i = 1, \dots, m\}, \quad (4.87)$$

chamado de espaço tangente em \mathbf{q} [20]. O integrador SHAKE não é simplético no seguinte sentido: embora satisfaça a condição $g(\mathbf{q}_n) = 0$ em todos os pontos da malha, a restrição «escondida» (3.62) não será, tipicamente, satisfeita, mesmo que as condições iniciais a satisfaçam [21].

No entanto, o método SHAKE é algebricamente equivalente ao método RATTLE, o qual é uma função em $T\mathcal{M}$. A ideia subjacente ao método RATTLE é corrigir a solução do

método SHAKE, para que esta esteja em $T\mathcal{M}$. Sintetizando, os algoritmos SHAKE e RATTLE são equivalentes nos pontos intermédios $t_{n+\frac{1}{2}}$, mas o método RATTLE satisfaz ambas as restrições, quanto à posição e à velocidade, nos pontos da malha. Neste sentido, o integrador RATTLE pode ser visto como um método através do qual as soluções produzidas pelo integrador SHAKE são projectadas simplecticamente em $T\mathcal{M}$.

Negligenciando erros de arredondamento, os métodos SHAKE e RATTLE são globalmente convergentes de ordem 2 [21]. A palavra de cautela é dada já que, no estudo de equações diferenciais algébricas, é frequente encontrar erros de arredondamento introduzidos via soluções inexatas das equações não lineares, os quais podem originar instabilidade na solução numérica.

Ambos os algoritmos são reversíveis no tempo.

O integrador RATTLE tem uma versão para o caso das restrições serem não holónomas [30]. Para o caso da Lagrangiana ser dada por $L = \frac{1}{2}\|\dot{\mathbf{q}}\|_2^2 - V(\mathbf{q})$, sujeita à restrição não holónoma $A(\mathbf{q})\dot{\mathbf{q}} = 0$, então uma escolha de uma Lagrangiana discreta produz o algoritmo

$$\begin{aligned} q^{k+\frac{1}{2}} &= q^k + \frac{h}{2}v_k \\ v_{k+1} &= v_k + h \left(-\nabla V(q^{k+\frac{1}{2}} + A(q^{k+\frac{1}{2}})^T \lambda_{k+1}) \right) \\ q^{k+1} &= q^{k+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}v_{k+1} \\ A(q^{k+1})v_{k+1} &= 0, \end{aligned} \tag{4.88}$$

onde $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{q}}$ representa a velocidade. Tal como o algoritmo RATTLE, este método é de ordem 2, reversível no tempo, sendo necessário um único cálculo da força por passo.

Os métodos Runge-Kutta particionados podem ser estendidos ao caso de sistemas com restrições [27, 30]. O método Lobbato IIIA-IIIB tem ordem $2\nu - 2$, com ν etapas, é reversível no tempo e é simplético para sistemas com restrições holónomas. Como é um método totalmente implícito, sempre que possível é preferível um método simples como o RATTLE; no entanto, se for exigida uma ordem maior ou se a Hamiltoniana não for separável, então os métodos Runge-Kutta particionados podem ser competitivos [30].

Capítulo 5

Dinâmica Molecular

O mundo físico é descrito pela mecânica clássica quando, por um lado, as «coisas» são tão pequenas e se movem com tão pouca velocidade que se pode ignorar a relatividade e, por outro lado, quando as «coisas» são tão grandes e se movem com uma velocidade tal, que se podem ignorar os efeitos quânticos. Pode dizer-se, então, que a mecânica clássica descreve um grande número de problemas, assim como deixa de fora outro tanto.

As equações do movimento de Newton, equações da mecânica clássica, traduzem a igualdade

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}, \quad (5.1)$$

onde \mathbf{F} representa a força, m a massa e \mathbf{a} representa a aceleração. As equações de Euler-Lagrange (2.4) são equivalentes às equações de Newton. Considere-se a função Lagrangiana dada pela diferença entre a energia cinética e potencial

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = T(\dot{\mathbf{q}}) - V(\mathbf{q}), \quad (5.2)$$

assumindo-se que a energia cinética é apenas função das velocidades e a energia potencial é apenas função das posições. Sendo a energia cinética dada por

$$T = \frac{1}{2}m\|\dot{\mathbf{q}}\|^2 \quad (5.3)$$

e a força dada por

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}, \quad (5.4)$$

obtêm-se as equações de Newton, a partir das equações de Euler-Lagrange (2.4), fazendo

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \right) &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right) - \left(\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}} \right) \\ &= \frac{d}{dt} (m\dot{\mathbf{q}}) - \mathbf{F} \\ &= m\ddot{\mathbf{q}} - \mathbf{F} \\ &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Estas equações têm a sua formulação hamiltoniana. Introduzindo a quantidade de movimento atômica $\mathbf{p} = M\dot{\mathbf{q}}$, a energia cinética é dada por

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{\|\mathbf{p}_i\|^2}{2m_i}, \quad (5.5)$$

e a função Hamiltoniana pode ser escrita como a soma da energia cinética e potencial. As equações do movimento assumem a forma

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}}_i &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \\ \dot{\mathbf{p}}_i &= \mathbf{F}_i \end{aligned} \quad (5.6)$$

As equações de Newton constituem um sistema de equações diferenciais ordinárias de segunda ordem. Para o resolver é necessário dispor das condições iniciais $(\mathbf{q}_0, \dot{\mathbf{q}}_0)$; conhecidas as posições e velocidades iniciais, é possível determinar quaisquer posições e velocidades futuras.

No campo da dinâmica molecular, resolve-se este sistema de equações diferenciais para N moléculas - tem-se $3N$ equações e $6N$ condições iniciais, considerando

$$\mathbf{q}_i = [x_i, y_i, z_i]^T$$

ou seja

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= [x_1 y_1 z_1 x_2 y_2 z_2 \cdots x_N y_N z_N]^T \\ &= [q_1^T q_2^T \cdots q_N^T]^T, \end{aligned}$$

e M uma matriz diagonal, com diagonal

$$(m_1 m_1 m_1 m_2 m_2 m_2 \cdots m_N m_N m_N),$$

onde m_i representa a massa da i -ésima partícula.

Nas simulações numéricas, e dependendo dos recursos computacionais disponíveis e do

objectivo da simulação, N pode variar entre 10^2 e 10^9 .

As simulações computacionais fazem a ponte entre o mundo nanoscópico das moléculas e dos átomos e o mundo macroscópico do laboratório - na expectativa de alargar a compreensão das propriedades e comportamento das moléculas e suas interações, servindo de complemento às experiências convencionais. Adicionalmente, as simulações fazem a ponte entre a teoria e a experiência. Pode testar-se uma teoria conduzindo-se simulações usando um modelo indicado pela teoria; pode testar-se o modelo comparando-o com resultados experimentais. Ou então, pode simular-se no computador situações muito difíceis ou impossíveis de simular no laboratório (por exemplo, trabalhar com temperaturas ou pressão extremas).

5.1 Potenciais intermoleculares

A única informação que falta nas equações de Newton é a expressão da função energia potencial. A energia potencial, geralmente, é decomposta na componente intermolecular e na componente intramolecular. As interações intermoleculares incluem:

1. repulsão na nuvem de electrões;
2. dispersão atractiva van der Waal's;
3. interações entre moléculas distintas ou átomos de uma mesma molécula separados por uma distância significativa - interações de Coulomb.

As forças intramoleculares incluem:

1. uma deformação axial da ligação química primária;
2. uma flexão da ligação química primária;
3. uma torção da ligação química primária em torno de um eixo que contém uma ligação química adjacente, o qual tem uma orientação espacial diferente.

No caso de se poderem negligenciar os graus de liberdade internos de uma molécula (incluem vibração e rotação em torno de uma ligação química), só se consideram interações

intermoleculares. Por exemplo, fluidos como o Argon não têm graus de liberdade internos; fluidos poliatômicos tais como O_2 , N_2 e CH_4 podem ser considerados pseudo átomos, ou seja, desprezam-se os graus de liberdade internos. Numa etapa introdutória à dinâmica molecular é usual considerar apenas fluidos simples, para os quais só se considera o potencial intermolecular.

Aliás, nas simulações computacionais clássicas, é bastante comum não representar os vínculos intramoleculares em termos da energia potencial, já que estes vínculos têm uma frequência de vibração muito alta - neste sentido, são tratados no contexto da mecânica quântica e não na mecânica clássica. Nas simulações no âmbito da mecânica clássica, estes vínculos são tratados como distâncias fixas. Por exemplo, fixando a distância d entre os átomos 1 e 2, a equação da restrição assume a forma

$$(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) - d^2 = 0,$$

e, na formulação lagrangiana, as forças da restrição que actuam nos átomos são adicionadas, de acordo com (2.25),

$$m_i \ddot{\mathbf{q}}_i = \mathbf{F}_i + \lambda \mathbf{G}_i^T,$$

onde λ representam os multiplicadores de Lagrange e

$$\mathbf{G}_1 = -2(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)$$

$$\mathbf{G}_2 = 2(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2).$$

Os potenciais intermoleculares são, em geral, caracterizados por potenciais 2-corpos ou N -corpos. No primeiro caso assume-se que a energia potencial total é calculada somando as interacções entre todas as combinações de pares de átomos. Os fluidos são bem descritos por potenciais desta forma. Os potenciais N -corpos incluem, adicionalmente, as contribuições das interacções entre 3 ou mais átomos.

5.1.1 O potencial de Lennard-Jones

Em dinâmica molecular, as interacções entre pares de átomos são, em geral, modeladas pelo potencial Lennard-Jones

$$V_{LJ}(r_{ij}) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right), \quad (5.7)$$

onde ε e σ são constantes que dependem dos átomos; ε representa a intensidade do potencial e σ é proporcional à distância de equilíbrio atômica. r_{ij} representa a distância entre os centros do átomos i e j

$$\begin{aligned} r_{ij} &= \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|_2 \\ &= \sqrt{(r_{x,i} - r_{x,j})^2 + (r_{y,i} - r_{y,j})^2 + (r_{z,i} - r_{z,j})^2}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

O gráfico da função potencial V_{LJ} (5.7), para $\sigma = 1$ e $\varepsilon = 1$, está representado na figura 5.1. As características principais deste potencial são [4, 13]:

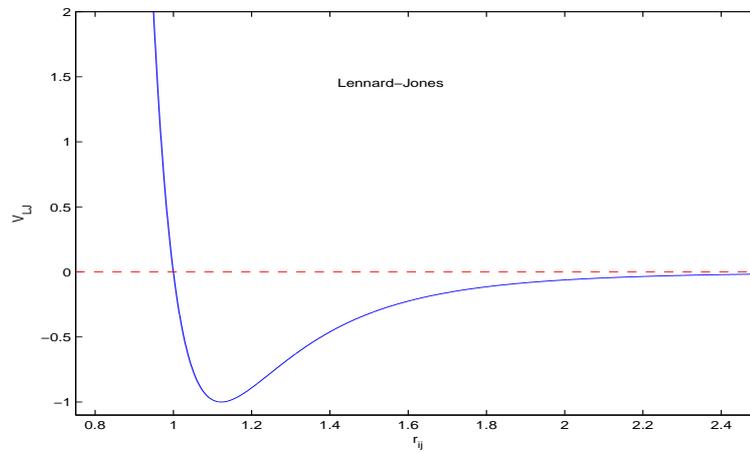


Figura 5.1: Potencial de Lennard-Jones, para $\sigma = 1$ e $\varepsilon = 1$

- (i) tem um mínimo absoluto à distância $r_{ij} = \sigma\sqrt[6]{2}$;
- (ii) a força devida ao potencial repele os átomos quando eles distam menos de $\sigma\sqrt[6]{2}$ e atrai-os caso contrário.

A parte atractiva, com dependência $-\frac{1}{r^6}$, é a força dispersiva ou de van der Waals. A parte repulsiva é devida ao princípio da exclusão de Pauli, o qual proíbe duas partículas de ocuparem o mesmo espaço. A forma repulsiva não é exactamente $\frac{1}{r^{12}}$, mas por um lado, é uma boa aproximação e, por outro lado, é mais conveniente em termos computacionais. A acção do potencial de Lennard-Jonnes diminui rapidamente com a distância $r > \sigma$. Por isso, é usual introduzir uma distância r_c , para além da qual o potencial é, aproximadamente, nulo. Simplificando, obtém-se uma versão truncada do potencial

$$V_{LJ} = \begin{cases} 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) & \text{se } r_{ij} \leq r_c \\ 0 & \text{se } r_{ij} > r_c \end{cases} \quad (5.9)$$

Verlet [38] considerou o valor de r_c dentro da banda $2.5\sigma \leq r_c \leq 3.3\sigma$.

O potencial de Lennard-Jones é um potencial do tipo 2-corpos, ou seja, a energia potencial total é dada pela soma de todas as combinações de pares de átomos

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N V_{LJ}(r_{ij}) \\ &= \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{i < j}^N V_{LJ}(r_{ij}), \end{aligned} \quad (5.10)$$

onde N representa o número total de átomos.

A força num átomo i devido à interacção com o átomo j é determinada pela equação (5.4)

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij} &= -\nabla V(r_{ij}) \\ &= \left[-\frac{\partial V}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial x_i} - \frac{\partial V}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial y_i} - \frac{\partial V}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial z_i} \right]^T \\ &= \frac{48\varepsilon}{\sigma} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{13} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^7 \right] \left[\frac{\partial r_{ij}}{\partial x_i} \quad \frac{\partial r_{ij}}{\partial y_i} \quad \frac{\partial r_{ij}}{\partial z_i} \right]^T \\ &= \frac{48\varepsilon}{\sigma^2} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 \right] [(x_i - x_j) \quad (y_i - y_j) \quad (z_i - z_j)]^T \\ &= \frac{48\varepsilon}{\sigma^2} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 \right] (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Naturalmente, tem-se que

$$\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji}, \quad (5.12)$$

que traduz a terceira lei de Newton, e a força total na partícula i é

$$\mathbf{F}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \mathbf{F}_{ij}. \quad (5.13)$$

5.2 Condições iniciais

Para resolver o sistema de equações diferenciais ordinárias é necessário a informação sobre a posição e a velocidade inicial de cada átomo - $3N$ posições e $3N$ velocidades. Existem algumas condições *standard* para inicializar simulações em dinâmica molecular, já que,

como a simulação só pode ser feita para alguns nanosegundos, a configuração inicial do problema a simular deve estar muito próxima do equilíbrio.

Nestas simulações é usual iniciar o sistema numa *lattice* - os átomos estão igualmente distribuídos num cubo. Esta configuração inicial é usada, essencialmente, por dois motivos:

1. é uma configuração bem definida e de fácil implementação;
2. tem a vantagem, sobre as configurações com posições aleatórias, de assegurar que não se verifique uma quase sobreposição dos átomos; quando os átomos, na configuração inicial, estão demasiado perto, podem originar forças repulsivas muito intensas e, conseqüentemente, que a simulação, logo nos passos iniciais, sofra uma «explosão».

O procedimento quanto às velocidades é, em geral, conforme se segue. As velocidades iniciais são geradas aleatoriamente, sendo reescaladas de acordo com três condições (as duas primeiras condições devem ser satisfeitas e a terceira é opcional):

1. a quantidade de movimento linear deve ser conservada;
2. a energia cinética deve relacionar-se com o teorema da equipartição termodinâmica

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \sum_{\alpha=x,y,z} v_{\alpha,i}^2 = \frac{3}{2} N k_B T, \quad (5.14)$$

onde k_B representa a constante de Boltzman e a temperatura T é especificada pelo utilizador.

3. a distribuição das velocidades deve seguir a distribuição de Maxwell-Boltzmann. À medida que o sistema se aproxima do equilíbrio, esta condição será satisfeita automaticamente; no entanto, quando satisfeita inicialmente, pode acelerar o processo de equilíbrio.

A lei de distribuição das velocidades, a lei de Maxwell-Boltzmann é [8]:

$$P(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} v^2 \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{mv^2}{k_B T} \right),$$

e pode ser verificada experimentalmente, medindo a acção da gravidade sobre as moléculas que saem de uma pequena abertura num recipiente que contém um gás (experiência de Esterman, Simpson e Stern, 1947).

5.3 Condições fronteira

Em geral, um sistema de equações diferenciais ordinárias não exige condições fronteira, mas somente condições iniciais. As condições fronteira periódicas fornecem um meio de simular um sistema infinito (pelo menos à escala molecular) com apenas algumas centenas ou milhares de átomos. Considere-se o volume de simulação com N partículas como uma célula unitária de um sistema, sendo este periodicamente reproduzido nas três direcções; neste sentido, a simulação pode ser considerada um sistema infinito. Cada célula imagem é do mesmo tamanho e forma da célula primária, contendo N partículas que são imagens das partículas da célula primária (a periodicidade estende-se à posição e à quantidade de movimento dos átomos). As condições fronteira respondem à questão sobre o que fazer a uma partícula que encontra a fronteira do cubo e sai - se as condições fronteira forem periódicas, qualquer partícula que saia da célula primária é substituída pela sua imagem (quando uma partícula sai pela face $x = L$ do cubo, ela torna a entrar pela face $x = 0$, mantendo-se o valor das outras componentes).

Cumulativamente, o uso de condições fronteira periódicas permite contornar um problema que surge em simulações de sistemas pequenos (algumas centenas ou milhares de partículas). Em sistemas de pequena dimensão, a simulação é dominada pelos efeitos das interacções das partículas com as paredes do recipiente as contém; se os efeitos dessas interacções não forem de interesse para a simulação, eles podem ser removidos pelo uso de condições fronteira periódicas.

Se o volume de simulação for um cubo no espaço, com N átomos dentro de si, será de esperar que durante o processo de simulação, alguns átomos sigam trajectórias que saiam fora desse cubo. Para que o número de partículas dentro do cubo seja constante, uma nova partícula deve entrar; e, para que a quantidade de movimento e a energia cinética sejam conservadas, essa nova partícula deve ter a mesma velocidade e a mesma energia potencial da partícula que saiu. As condições fronteira periódicas são implementadas de forma a satisfazer estes constrangimentos.

Se N partículas estão num cubo de aresta L , com condições fronteira periódicas impostas, então, em qualquer instante, a uma partícula com coordenadas x, y, z dentro do cubo, está associada a um número infinito de imagens periódicas, com coordenadas obtidas por adi-

cionar ou subtrair múltiplos de L em cada coordenada [3].

Ao uso de condições fronteira periódicas está associado o uso da «convenção da imagem mais próxima». Uma partícula i posicionada dentro da célula principal interage com todas as $N - 1$ partículas dentro desse volume e, também com todas as imagens dessas $N - 1$ partículas. Mesmo para potenciais de curto alcance, tal como o potencial de Lennard-Jones (5.9), tal implicaria

1. no caso bidimensional: a consideração de 8 células vizinhas à célula principal (admitindo que é uma escolha razoável para o alcance do *cut-off*);
2. no caso tridimensional: a consideração de 26 células vizinhas à célula principal.

Assim, a partícula i ao interagir com a partícula j (ambas dentro da célula principal), também deveria interagir com as imagens da partícula j : 8 no caso bidimensional, e 26 no caso tridimensional. De acordo com a convenção da imagem mais próxima, a partícula i irá interagir com a partícula j da seguinte forma: assume-se que a partícula i apenas irá interagir com a partícula j ou apenas com uma imagem da partícula j (escolhendo-se a partícula j ou uma sua imagem, consoante a distância até à partícula i). Em suma, a partícula i ou irá interagir com a partícula j (que está dentro do volume principal) ou com uma sua imagem, se esta estiver mais próxima da partícula i . Desta forma, o número de interações totais reduz-se a $\frac{N(N-1)}{2}$.

5.4 Cálculo da força e a utilização de listas

À medida que o sistema aumenta em número de partículas, a maior parte do tempo de simulação é gasto no cálculo da força. Como o número de interações no sistema é de $\frac{N(N-1)}{2}$, tal significa que o custo do cálculo da força é proporcional a N^2 . Para contornar este obstáculo, Verlet [38], notando que a mudança nas posições, em cada passo, é muito pequena dado que o passo h também é muito pequeno, sugeriu o uso de listas vizinhas para pares de átomos.

Considera-se um raio r_l tal que $r_l > r_c$. Na primeira iteração, para cada átomo, é construída uma lista com todos átomos vizinhos que distem menos de r_l . Nas iterações seguintes, no cálculo da força, os únicos pares de átomos que entram em linha de conta

são os que constam dessa lista; de x em x iterações, a lista é reconstruída. É evidente que a interação entre o átomo i e o átomo j , que dista dele d , com $r_c < d < r_l$, vai ser nula, mas esta margem serve de «zona de segurança». A escolha de r_l é um compromisso: listas grandes necessitam de ser reconstruídas com menos frequência do que listas mais restritas; no entanto, quanto maior a dimensão da lista, mais recursos computacionais e temporais são exigidos.

5.5 Leis de conservação

De acordo com o teorema de Noether (2.14), as leis de conservação em sistemas dinâmicos são consequências de simetrias na Lagrangiana. Para sistemas N -corpos isolados, verificam-se as seguintes leis de conservação:

1. massa
2. energia
3. quantidade de movimento linear
4. quantidade de movimento angular.

No entanto, quando os sistemas isolados são simulados com condições fronteira periódicas, essas simetrias podem ser quebradas e as leis de conservação deixam de o ser.

Massa

Os sistemas isolados têm um número constante de partículas. O uso de condições fronteira periódicas não afecta o número de partículas na célula primária e, conseqüentemente, a lei de conservação da massa continua válida.

Energia

Como é que o uso de condições fronteira periódicas afecta a conservação de energia? A energia potencial é calculada usando uma partícula ou uma sua imagem, a energia total

do sistema mantém-se inalterada [10]. A energia

$$\begin{aligned} E &= H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} p_i^T p_i + \sum_{i=2}^N \sum_{j=1}^{i-1} V_{ij} (\|q_i - q_j\|) \end{aligned} \quad (5.15)$$

é, então, uma constante do movimento.

Quantidade de movimento linear

A lei de conservação da quantidade de movimento linear é válida, mesmo após a aplicação de condições fronteira periódicas, já que a imagem de um átomo i tem a mesma quantidade de movimento do próprio átomo. Então,

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i \quad (5.16)$$

pode ser calculado a partir das N partículas da célula primária.

Quantidade de movimento angular

Em sistemas isolados

$$\sum_i^N \mathbf{q}^i \times \mathbf{p}_i = \text{const.} \quad (5.17)$$

No entanto, para as N partículas da célula primária, a aplicação de condições fronteira periódicas quebram a lei de conservação (5.17). [10] mostra que ao fim de algum tempo, quando o número de partículas que saiu da célula primária é igual em todas as direcções, a quantidade de movimento angular irá flutuar à volta de um valor.

5.6 Integradores geométricos vs. Dinâmica molecular

5.6.1 Natureza dos sistemas dinâmicos moleculares

Os sistemas dinâmicos no âmbito da dinâmica molecular são acentuadamente não lineares e têm como que a «marca» do caos, exibindo uma dependência sensível a perturbações. Consequentemente, e atendendo, também, à geração aleatória das velocidades

iniciais, para integrações no longo prazo, a precisão quanto a trajectórias individuais não é desejável nem atingível [13, 22, 36]. A integração no longo prazo irá retratar o comportamento representativo e genérico do sistema, possibilitando o cálculo de grandezas, nomeadamente a temperatura.

A argumentação a favor do uso de integradores geométricos no campo da dinâmica molecular pode ser feita conforme se segue [22]. Tradicionalmente, os métodos numéricos são analisados em termos da sua estabilidade e da sua precisão. Grosso modo, «estabilidade» significa uma reacção limitada face a perturbações e «precisão» significa precisão com respeito a uma trajectória particular. Ora, estes conceitos têm um valor prático limitado no tratamento de sistemas de dinâmica molecular, no longo prazo, devido à dependência sensível das condições iniciais. Em suma, embora a estabilidade clássica e a precisão local sejam um pré-requisito para que um integrador funcione bem em dinâmica molecular, estes conceitos são, por si só, insuficientes. Aliás, já que só é de exigir baixa precisão nas trajectórias, em virtude da sua natureza caótica, sugere-se o uso de integradores de ordem baixa [4].

Uma aproximação alternativa é mostrar que a trajectória numérica é vizinha da trajectória verdadeira de um sistema de equações diferenciais vizinho e, idealmente, este terá propriedades dinâmicas similares ao sistema dinâmico original. Este ponto de vista é partilhado pela análise *backward* do erro - o fluxo numérico gerado por uma discretização simpléctica de um sistema hamiltoniano é o fluxo exacto de um sistema hamiltoniano vizinho. Dito de outra forma, a diferença entre a solução numérica e a solução exacta é expressa em termos de uma perturbação do problema. A análise *backward* é mais interessante do que a análise *forward*, em particular no campo da dinâmica molecular, já que a natureza caótica de sistemas moleculares significa que qualquer pequeno erro numérico resultará em grandes erros na trajectória. A natureza dos sistemas dinâmicos moleculares impõe severas limitações nas simulações numéricas [4]: em termos do passo temporal e, conseqüentemente, em termos do intervalo temporal máximo no qual a simulação é possível.

5.6.2 O método Störmer-Verlet na Dinâmica Molecular

O método Störmer-Verlet é «o cavalo de corrida» e o «padrão de ouro» da dinâmica molecular [3]. A sua excelente *performance* nesta área (consequência das suas propriedades) e o facto de ser um método explícito explicam o seu uso privilegiado. Aliás, em virtude das forças dominarem o custo de computação, será desejável trabalhar com métodos explícitos - não esquecer que o método Verlet é explícito, só avalia a força uma única vez por passo e é de ordem 2 (baixa) [4]. A conservação de primeiros integrais complementa a justificação da sua atractividade. Por exemplo, a comunidade física, desde os anos 60, procurava um método que reproduzisse a reversibilidade temporal presente nos sistemas N -corpos; no campo da astrofísica, em simulações de N -corpos, o interesse assentava na conservação da quantidade de movimento angular. Ora, o método Störmer-Verlet conserva estes dois invariantes do movimento.

O comportamento correcto de um integrador relativamente ao oscilador harmónico parece ser uma propriedade necessária para o sucesso das simulações em dinâmica molecular, embora não suficiente [22, 36]. Este oscilador permite lançar luz sobre o comportamento vibracional no potencial intramolecular, altamente vibratório. As suas equações do movimento são

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{q}}{dt} &= \mathbf{p} \\ \frac{d\mathbf{p}}{dt} &= -\omega^2\mathbf{q},\end{aligned}$$

onde ω representa a velocidade angular do oscilador. Analiticamente, quando se retrata $\mathbf{p}(t)$ nas abcissas e $\omega\mathbf{q}(t)$ nas ordenadas, obtém-se uma órbita circular, para o qual se verifica uma rotação de ωh para cada passo temporal da solução. Usando o método Störmer-Verlet, resulta

$$\begin{pmatrix} \omega\mathbf{q}^{n+1} \\ \mathbf{p}_{n+1} \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} D^{-1} \begin{pmatrix} \omega\mathbf{q}^n \\ \mathbf{p}_n \end{pmatrix}$$

onde

$$\theta = 2 \arcsin \frac{\omega h}{2}$$

e

$$D = \text{diag} \left(1, \cos \frac{\theta}{2} \right),$$

desde que $\omega h \leq 2$ [37]. Esta restrição, necessária para a estabilidade do método, é a condição mais fraca de um método explícito. Pelo método Verlet, verifica-se uma expansão, seguida de uma rotação e, finalmente, seguido de uma contracção; nesta sequência, a expansão é anulada pela contracção. Este método preserva a característica qualitativa da solução. Este método é muito popular na dinâmica molecular, em particular, já que sendo um integrador simpléctico, tem uma excelente *performance* no longo prazo.

5.6.3 Alternativas ao método Störmer-Verlet

As alternativas ao método Störmer-Verlet podem ser ponderadas da forma seguinte [22]. No campo da dinâmica molecular, têm sido propostos e implementados ao longo dos anos algoritmos alternativos - passam por métodos multipasso, tais como os métodos Gear explícitos, e pela família Runge-Kutta. Ora, por um lado, estes métodos não são, em geral, simplécticos nem reversíveis e, por outro lado, não é claro que a ordem extra obtida seja relevante, uma vez que eles exibem, no que concerne à energia, uma estabilidade relativamente fraca no longo prazo. A vantagem principal dos métodos multipasso reside na precisão significativa obtida com um custo mínimo em termos de cálculo da força. Os métodos Runge-Kutta envolvem uma sequência de estágios intermédios e, cada um deles exige o cálculo de uma força; por este motivo, provavelmente, não será vantajoso considerar métodos da família Runge-Kutta de ordem significativa em simulações em dinâmica molecular, já que uma precisão significativa não é um requisito crítico.

Os métodos implícitos exigem a resolução de um sistema de equações não lineares por cada passo. Estes métodos são utilizados com a expectativa de contornar as restrições de estabilidade, de forma a usar um passo temporal maior. A utilização dos métodos Gauss-Legendre, da família Runge-Kutta, deve ser ponderada atendendo aos custos de implementação acrescidos. O que dizer da regra do ponto médio implícita? A análise da integração do oscilador harmónico por este método lança alguma luz. Uma iteração satisfaz

$$\begin{pmatrix} \omega \mathbf{q}^{n+1} \\ \mathbf{p}_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega \mathbf{q}^n \\ \mathbf{p}_n \end{pmatrix}$$

onde

$$\theta = 2 \arctan \frac{\omega h}{2}.$$

Tal como no método Störmer-Verlet, existe uma rotação mas, não se verifica nenhuma expansão nem contracção. No entanto, quando se considera o comportamento deste integrador para passos temporais grandes, a frequência é completamente distorcida - quando $h \rightarrow \infty$, tem-se que $\theta \rightarrow \pi$. Em suma, embora não exista nenhuma restrição em h , motivada por razões de estabilidade, as frequências altas não são representadas com precisão, a não ser que h seja proporcionalmente pequeno.

5.7 Uma aplicação à dinâmica molecular

Nesta secção apresentam-se e interpretam-se os resultados de uma simulação em dinâmica molecular levada a cabo com o método Störmer-Verlet. O problema foi testado em diversos cenários.

5.7.1 Configuração inicial

Considere-se uma *lattice* do tipo fcc, no qual cada célula é do tipo representado na figura 5.2; cada partícula é posicionada nos vértices do cubo e, adicionalmente, é colocada uma partícula no centro de cada face do cubo. Se o número de partículas for $N = 4M^3$, com $M = 1, 2, 3, \dots$, então as partículas preenchem um volume cúbico. Por este motivo, no caso de se usar uma *lattice* do tipo fcc em simulações em dinâmica molecular, o número de partículas é $32 = 4 \times 2^3$, $108 = 4 \times 3^3$, $256, 500, 864, \dots$. Na simulação que se segue escolheu-se $N = 108$. Se $N \neq 4M^3$, então alguns espaços da *lattice* ficarão desocupados.

O primeiro critério de escolha dos diferentes cenários a testar é a ausência ou a presença de «listas» nas 108 partículas. No caso da ausência de «listas», a configuração inicial é a que está representada na figura 5.3. Diz-se que o sistema tem «listas» quando as 108 partículas são agrupadas em subconjuntos; as partículas que pertencem à mesma «lista» ou subconjunto (representam, portanto, entidades moleculares) interagem de forma mais intensa do que as partículas que pertencem a subconjuntos diferentes. A figura 5.4 ilustra a configuração inicial de tal sistema, tendo sido representadas, por uma questão de clareza, apenas 3 dessas listas; foram formadas 12 «listas» e as partículas que pertencem ao mesmo subconjunto foram sinalizadas com a mesma cor. Cada lista é formada por um mínimo

de 6 partículas e por um máximo de 12 partículas.

Na configuração inicial dos dois casos, sem e com «listas», assumiu-se uma velocidade inicial das partículas nula, de forma a garantir que a quantidade de movimento linear fosse igual ao vector nulo.

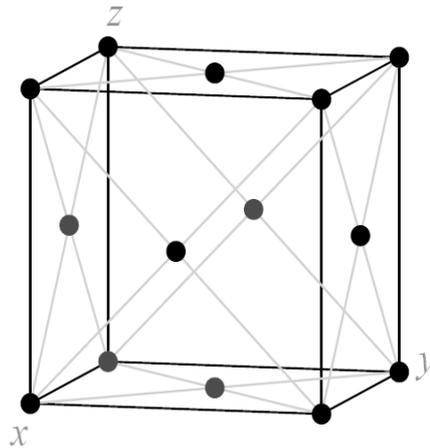


Figura 5.2: Célula de uma *lattice* do tipo fcc

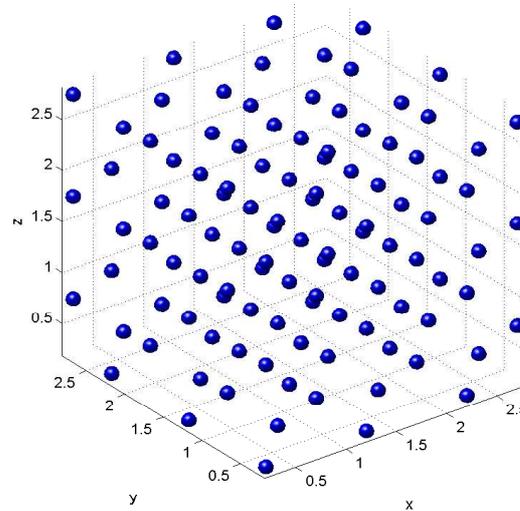


Figura 5.3: Configuração inicial - *lattice* do tipo fcc com 108 partículas, com velocidades iniciais nulas

5.7.2 Função potencial

Admitindo que se está a simular a dinâmica de um fluido simples, ignoram-se as parcelas do potencial associadas às interações intramoleculares. Para a interacção intermolecular,

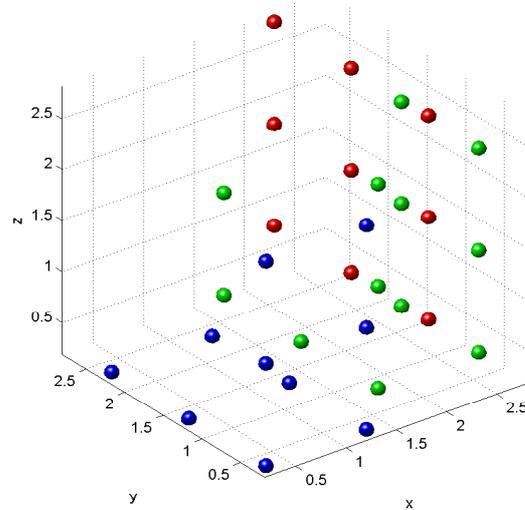


Figura 5.4: Configuração inicial - *lattice* do tipo fcc com 108 partículas, com «listas», estando apenas representadas 3 delas, com velocidades iniciais nulas

considera-se o potencial de Lennard-Jones (5.7), com $\sigma = 1$. No caso do cenário sem «listas», usou-se $\varepsilon = 1$; nos testes com a consideração de «listas», foram usados dois valores para ε , consoante as partículas pertençam ou não à mesma «lista».

Na simulação, como o número de partículas é moderado, não se usou a expressão (5.9) e, conseqüentemente, também não foram utilizadas as listas de Verlet.

5.7.3 Equações do movimento

As equações do movimento que modelam o problema a simular são as equações de Newton

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{q}^i &= \mathbf{v}_i \\ m_i \frac{d}{dt} \mathbf{v}_i &= \mathbf{F}_i, \quad i = 1, \dots, 108, \end{aligned} \quad (5.18)$$

assumindo-se $m_i = 1$, com $i = 1, \dots, 108$. Para a integração numérica foi utilizado o método Störmer-Verlet (3.46).

5.7.4 Simulações numéricas

Todas as simulações são efectuadas sem o recurso a condições fronteira periódicas e com o uso do potencial de Lennard-Jones (5.7), com $\sigma = 1$ (igual à distância inicial entre duas

partículas «consecutivas»).

Cenário 1

O algoritmo é testado com as seguintes condições:

- (i) configuração inicial sem «listas» e consideração de $\varepsilon = 1$ na função potencial;
- (ii) o movimento das partículas é livre de qualquer constrangimento e acção de força externa.

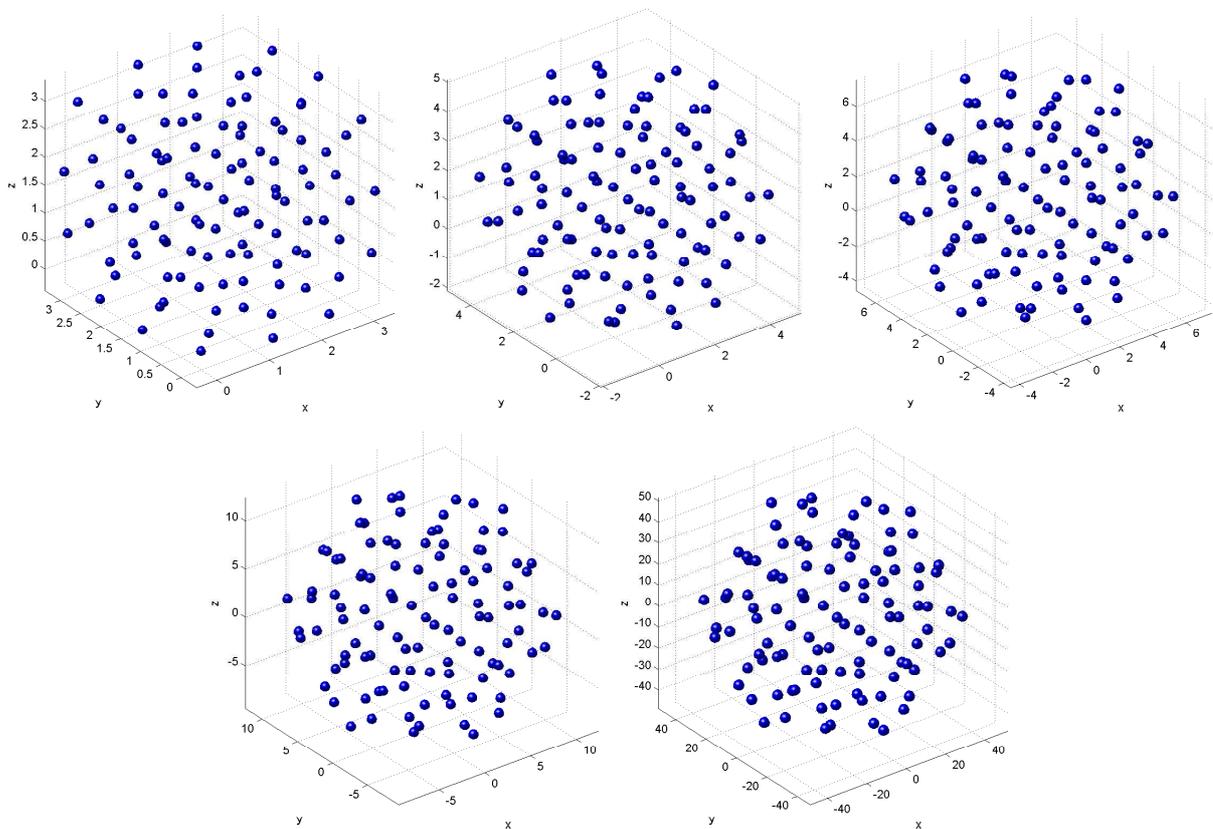


Figura 5.5: Configurações intermédias e final do cenário 1, com passo 10^{-4} ; o intervalo temporal considerado é $t \in [0, 1]$, visualizando-se as posições das partículas ao fim de 150, 500, 1000, 2000 e 10000 passos, respectivamente

Neste cenário fez-se a simulação com dois passos: 10^{-3} e 10^{-4} ; o intervalo temporal de integração é $t \in [0, 1]$. As configurações intermédias e final, para o passo 10^{-4} , constam na figura 5.5. A observação das várias configurações permite concluir que as partículas saem

do cubo inicial de simulação, em todas as direcções. Aliás, como a distância inicial entre as partículas é inferior ao mínimo do potencial de Lennard-Jonnes, inicialmente verifica-se uma forte repulsão entre as partículas. Por outro lado, é visível que a partir dos 1000 passos, sensivelmente, as posições relativas das partículas mantêm-se.

A figura 5.6 mostra, em termos comparativos, o erro na energia (diferença entre a energia de dois passos consecutivos), para o passo 10^{-3} e 10^{-4} . É visível que, no início da

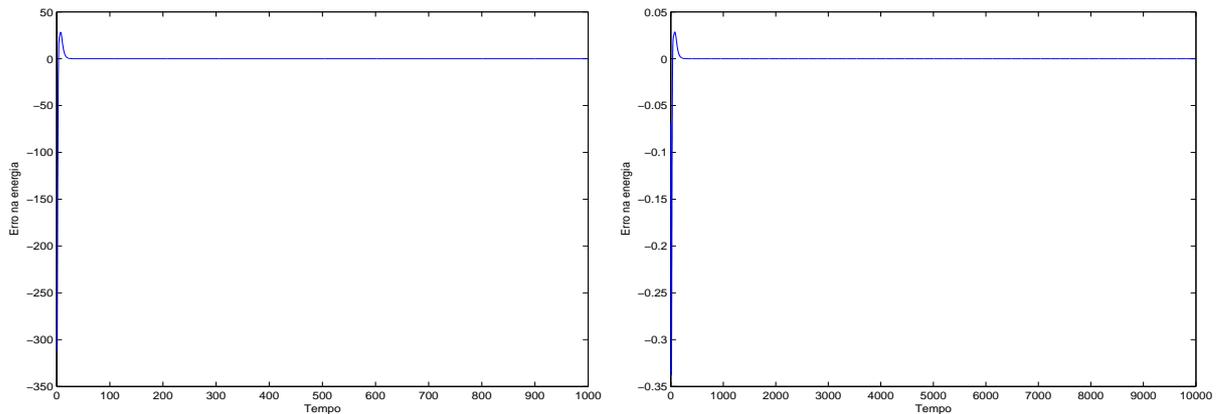


Figura 5.6: Erro na energia do cenário 1, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente, ao longo de toda a simulação

simulação, o erro na energia é bastante significativo, especialmente para o passo maior; grosso modo, após os primeiros 100 ou 1000 passos, respectivamente, o erro na energia estabiliza em torno de zero. Tal situação pode ser justificada pelo atingir do equilíbrio do sistema; tal significa que no início da simulação o sistema não estaria muito próximo do equilíbrio, verificando-se uma certa instabilidade na energia.

Uma partícula estará em equilíbrio em x_e se aí estiver em repouso, $\dot{x}_e = 0$, e se x_e for um ponto de estacionaridade do potencial [8]. Os pontos de estacionaridade podem ser mínimos, máximos ou pontos de inflexão. No caso de um mínimo, se o sistema for desviado relativamente à sua posição de equilíbrio, a força que actua tende a levar o sistema de volta a essa posição: o equilíbrio em torno de um mínimo do potencial é um equilíbrio estável. Pelo contrário, o equilíbrio em torno de um máximo é um equilíbrio instável. Num ponto de inflexão o equilíbrio é estável para deslocações para um lado e instável para deslocações para o outro.

No intuito de se saber, com maior detalhe, o erro na energia ao longo da fase de estabilização, retrata-se o seu comportamento entre os 5000 e os 10000 passos (ver figura 5.7).

O erro na energia exibido é, em termos teóricos, o esperado: o método Störmer-Verlet não

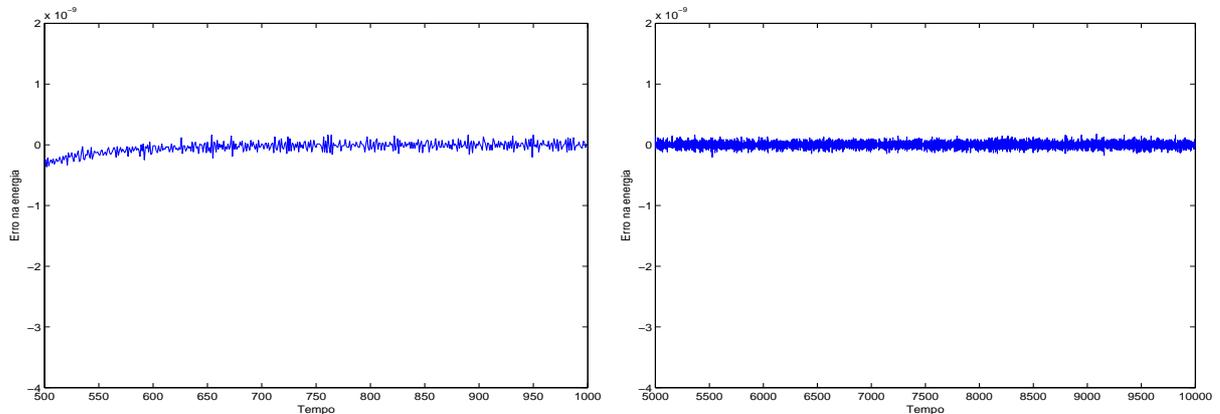


Figura 5.7: Erro na energia do cenário 1, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente, na segunda metade da simulação

conserva exactamente a energia, mas fá-lo de forma aproximada; o erro oscila de forma limitada à volta de zero. Nesta simulação, o erro é muito pequeno, na ordem de 10^{-9} .

Observe-se o comportamento da energia cinética, energia potencial e energia total para o passo 10^{-4} (ver figura 5.8). A energia cinética e a energia potencial no início da simulação exibem um comportamento atípico, relativamente aos últimos 9000 passos; inicialmente, a energia cinética cresce abruptamente, ao passo que a energia potencial o faz em sentido contrário. Como a subida da energia cinética não é compensada pelo comportamento oposto da energia potencial, a energia total demonstra uma tendência de subida, na fase inicial da simulação. Após esta fase inicial de «instabilidade» na energia cinética e na energia potencial, ambas estabilizam e, conseqüentemente, também a energia total estabiliza.

A quantidade de movimento linear é uma grandeza vectorial preservada pelo método Störmer-Verlet. Observe-se a figura 5.9, que retrata o comportamento de cada componente da quantidade de movimento linear, ao longo de toda a simulação e para os dois passos. Inicialmente, cada componente da quantidade de movimento linear é nula, atendendo a que as velocidades iniciais são nulas e, conseqüentemente, a soma em cada uma das direcções também é igual a zero. A quantidade de movimento linear é praticamente conservada, já que os valores das componentes do vector rondam o zero.

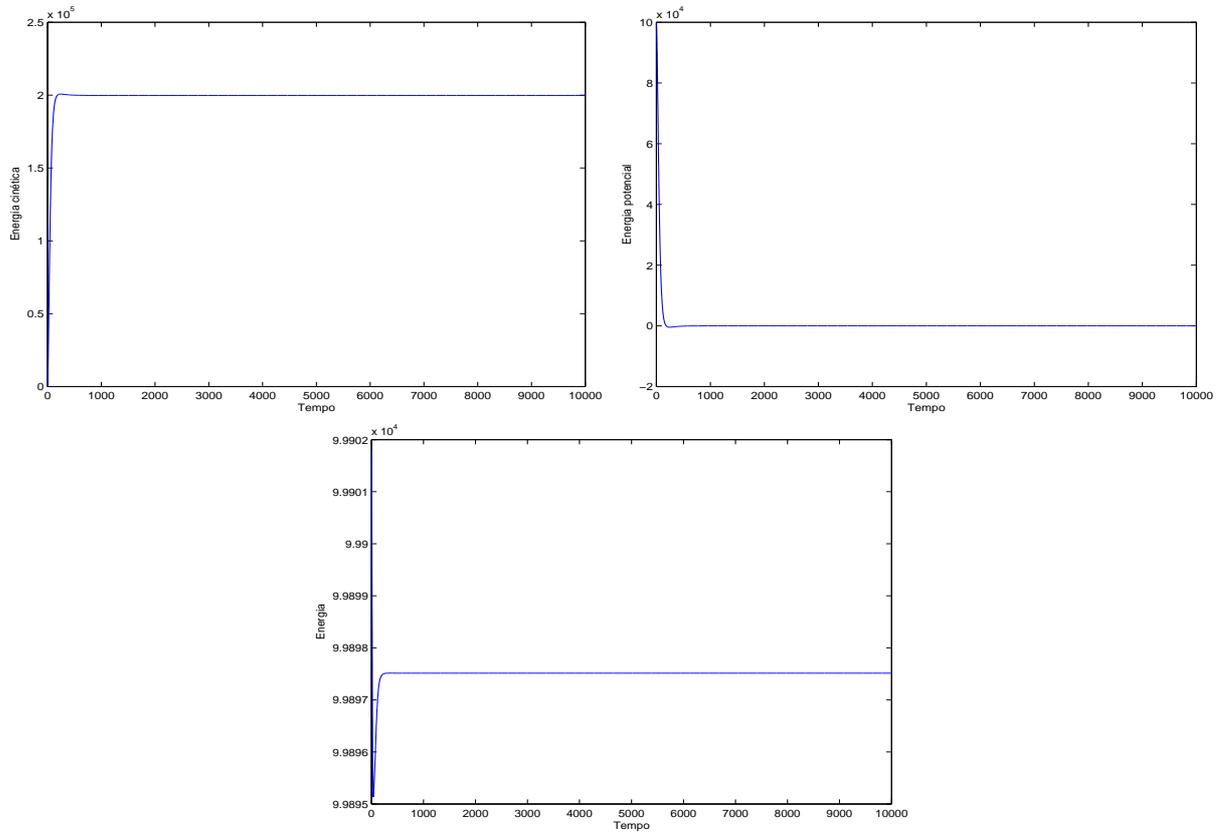


Figura 5.8: Evolução da energia cinética, energia potencial e energia total do cenário 1, com passo 10^{-4}

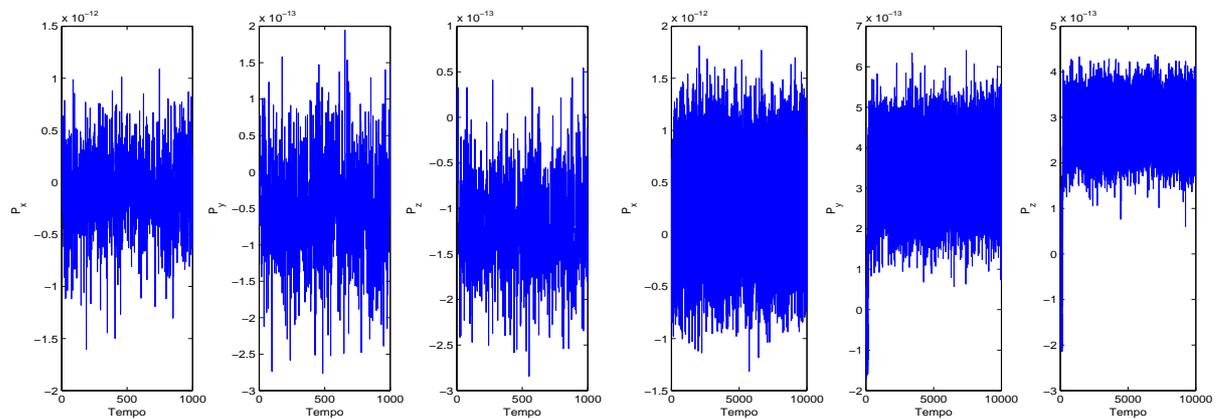


Figura 5.9: Evolução das componentes da quantidade de movimento linear, para os passos 10^{-3} (3 primeiras figuras) e 10^{-4} (3 últimas figuras), no cenário 1

Cenário 2

O cenário 2 difere do cenário 1 unicamente no uso de «listas». Na função potencial (5.7), usa-se $\varepsilon = 100$ no caso das partículas pertencerem ao mesmo subconjunto e $\varepsilon = 1$ caso

contrário. Por uma questão de clareza, optou-se por «seguir» a trajectória de apenas 3 «listas» ou moléculas, de um total de 12.

A evolução da posição das «listas» está retratada na figura 5.10. Analogamente ao cenário

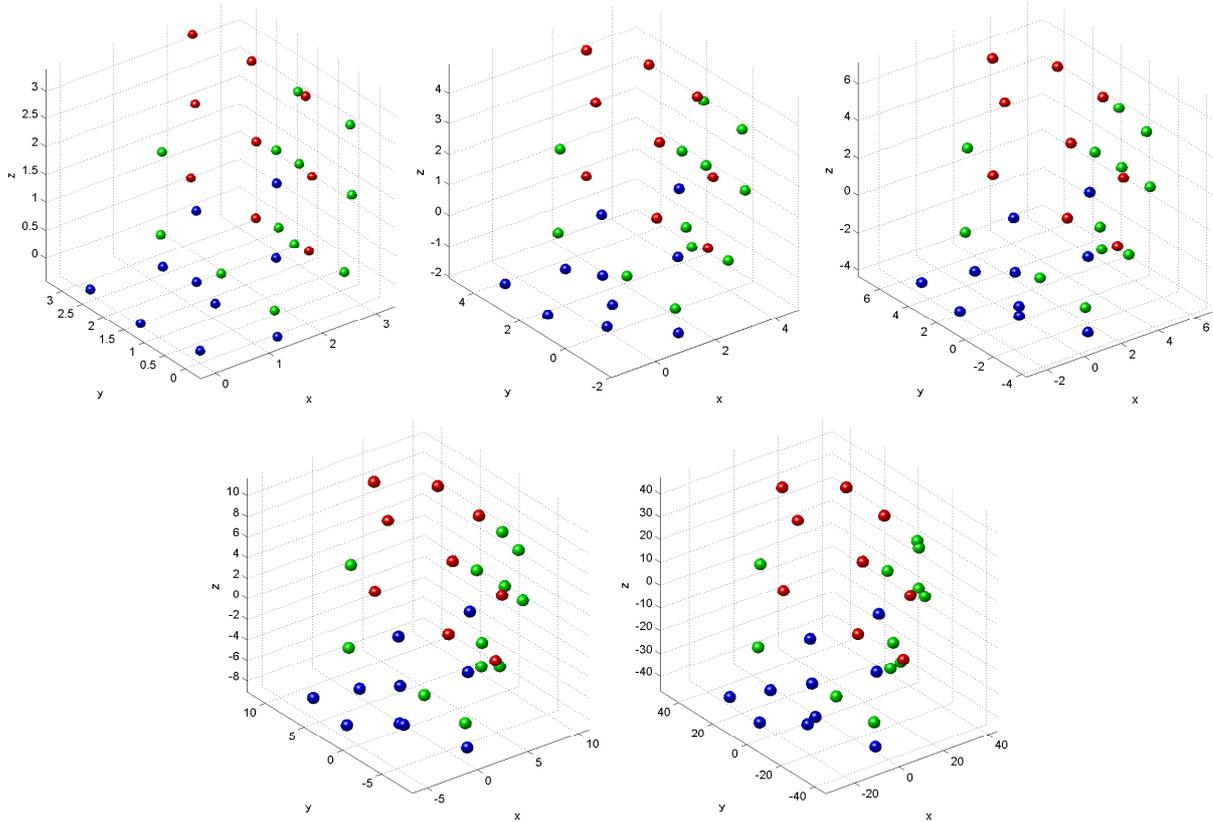


Figura 5.10: Configurações intermédias e final do cenário 2, com passo 10^{-4} ; o intervalo temporal considerado é $t \in [0, 1]$, visualizando-se as posições das partículas ao fim de 150, 500, 1000, 2000 e 10000 passos, respectivamente

1, as partículas saem fora do cubo de simulação, em todas as direcções. Embora a interacção entre as partículas pertencentes a uma mesma «lista» seja mais intensa do que a interacção entre as partículas que pertencem a «listas» diferentes, não é visível que, em geral, partículas do mesmo subconjunto se «aproximem». Tal pode ser justificado pelo facto de $\varepsilon = 100$ não ser suficientemente grande relativamente a $\varepsilon = 1$, ou seja, a diferença de intensidade do potencial não é suficiente para «aproximar» partículas da mesma «lista». De forma similar ao cenário 1, a observação da figura 5.10 conduz à conclusão que o equilíbrio do sistema é atingido por volta dos 1000 passos; a partir daí, as partículas movem-se, mas a sua posição relativa é, grosso modo, mantida. Este facto é

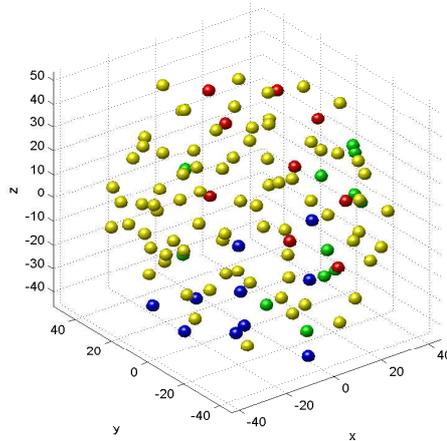


Figura 5.11: Configuração final do cenário 2, com passo 10^{-4} , com a totalidade das partículas

congruente com o comportamento exibido pela energia.

Para contextualizar estes 3 subconjuntos no total de partículas do sistema, pode visualizar-se a figura 5.11. Nesta figura, as 3 «listas» estão sinalizadas com as cores habituais, ao passo que as restantes «listas» estão todas sinalizadas de amarelo. A observação da configuração final com a totalidade das 108 partículas, por comparação com a configuração final do cenário 1 (figura 5.5), permite concluir que no cenário 2 as movimentações das partículas não foram mais «contidas» do que no cenário prévio; a amplitude do movimento foi da mesma ordem.

O erro na energia, para ambos os passos, é exibido na figura 5.12. De forma similar ao

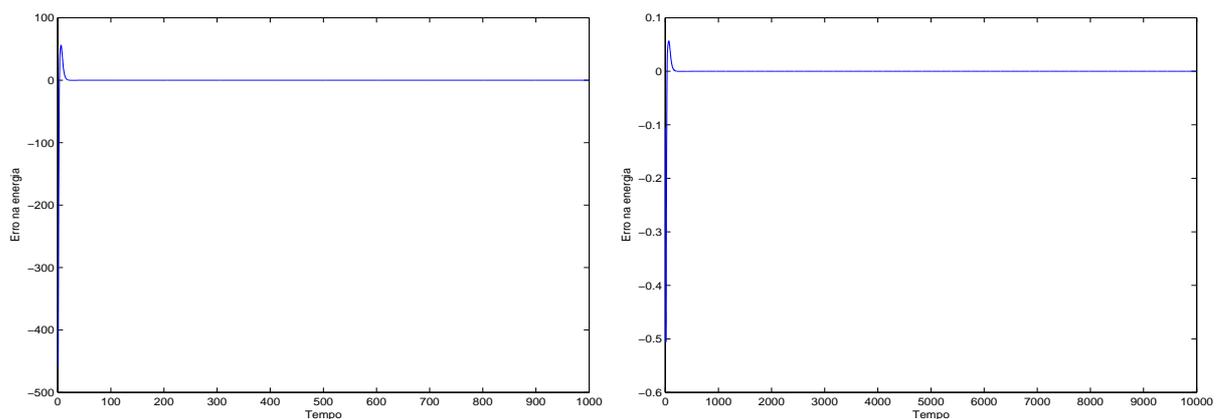


Figura 5.12: Erro na energia do cenário 2, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente, ao longo de toda a simulação

cenário 1, o erro na energia apresenta um «pico» até cerca de $\frac{1}{10}$ do tempo de simulação

e, de seguida, estabiliza em torno de zero. Para se conseguir obter uma informação mais detalhada sobre o erro na energia após a sua fase de estabilização, observe-se a figura 5.13. Para o passo 10^{-3} , o erro na energia não é desprezível e, por isso, as soluções obtidas não

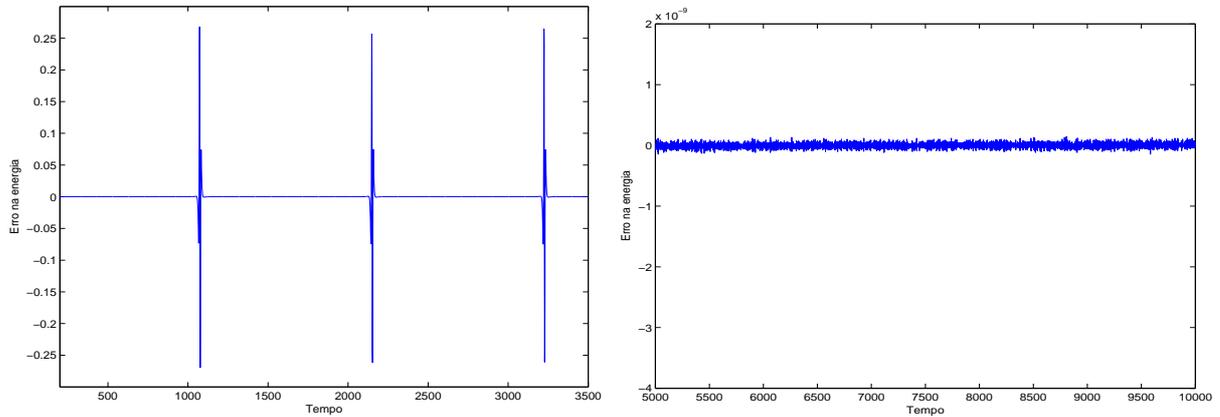


Figura 5.13: Erro na energia do cenário 2, com passo 10^{-3} e 10^{-4} , respectivamente. No primeiro caso, entre os passos 300 e 3500 e, no segundo caso, para a segunda metade da simulação

são as desejáveis. Já quanto ao passo 10^{-4} , o comportamento do erro na energia é o teoricamente esperado: oscilações em torno de um valor, mesmo no longo prazo.

A energia cinética, a energia potencial e a energia total estão representadas na figura 5.14. O seu comportamento é, em termos de tendência, semelhante ao cenário 1; grosso modo, a energia total estabiliza decorrido 10% do tempo de simulação, já que as suas parcelas também estabilizam. No primeiro décimo, a energia cinética cresce de forma abrupta, contrastando com a energia potencial que decresce; a partir daí, a energia total apresenta um valor que se mantém até ao final da simulação.

Atente-se ao comportamento exibido pela quantidade de movimento linear, observável na figura 5.15. Embora, à primeira vista, pareça que o valor de cada uma das componentes da quantidade de movimento linear oscile, note-se que tal é na ordem de 10^{-12} e 10^{-13} , ou seja, a quantidade de movimento linear é praticamente conservada.

Cenário 3

O cenário 3 é idêntico ao cenário 2, com exceção do valor de ε atribuído às interações entre partículas de uma mesma «lista». Assim, na função potencial (5.7), nas interações entre partículas de subconjuntos diferentes continuará a usar-se $\varepsilon = 1$, ao passo que nas

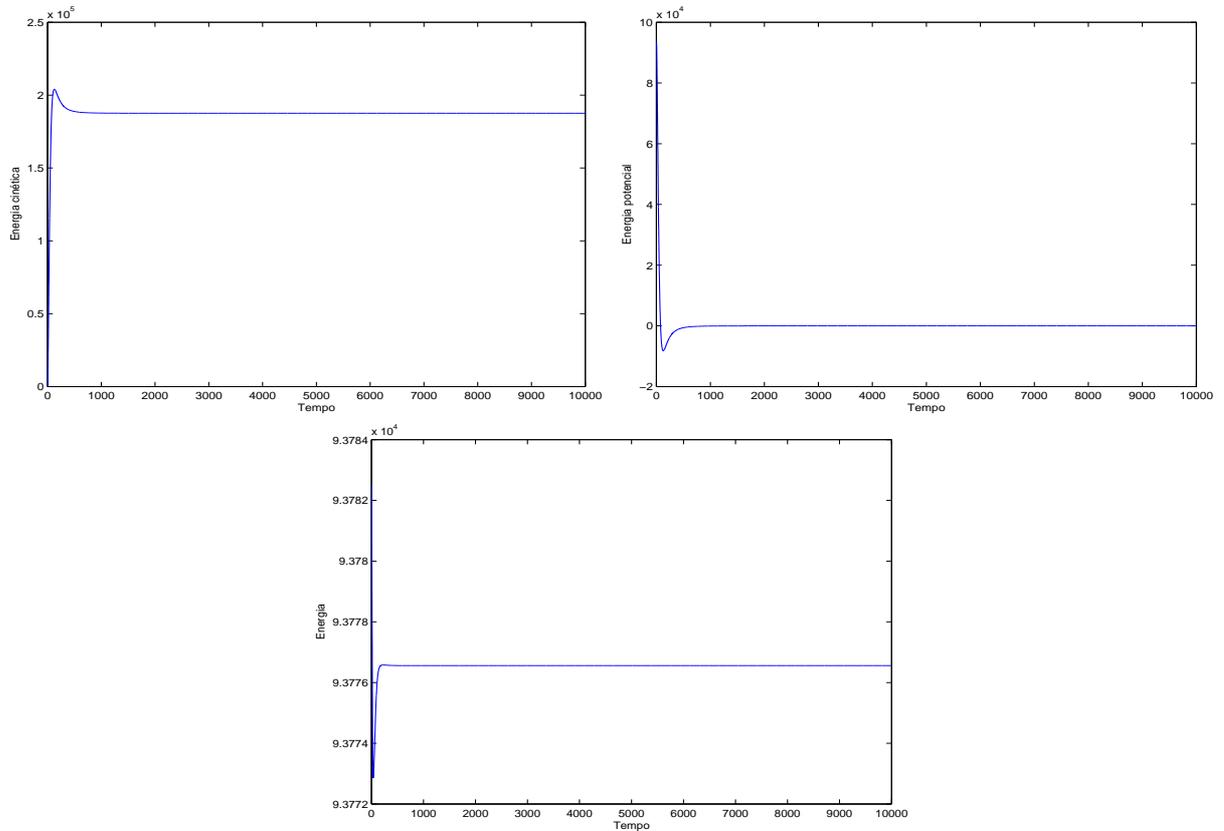


Figura 5.14: Evolução da energia cinética, energia potencial e energia total do cenário 2, com passo 10^{-4}

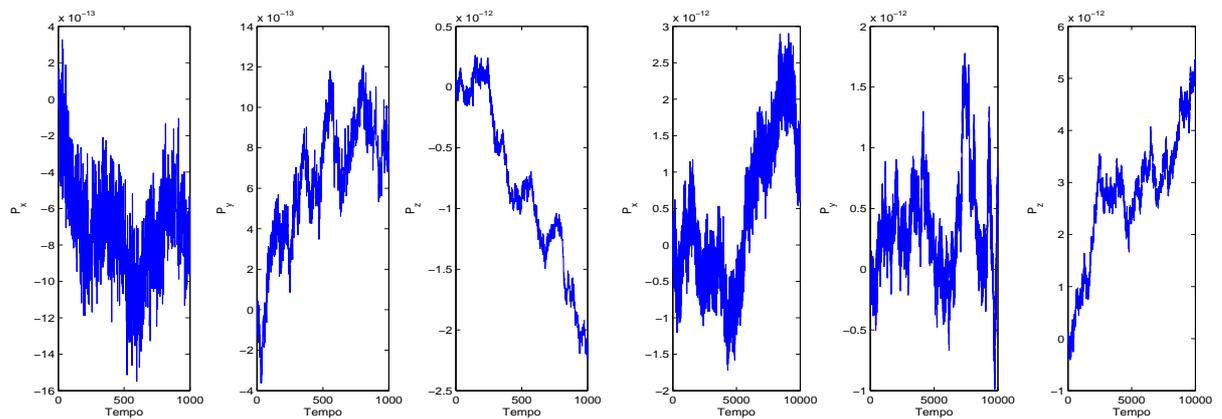


Figura 5.15: Evolução das componentes da quantidade de movimento linear, para os passos 10^{-3} (3 primeiras figuras) e 10^{-4} (3 últimas figuras), no cenário 2

interacções entre partículas do mesmo subconjunto, usar-se-á $\varepsilon = 1000$. Este cenário, por comparação com o cenário anterior, permite testar a reacção do sistema a um aumento da intensidade do potencial nas interacções «intraalista» ou intramolecular.

Na figura 5.16 estão representados «instantâneos» da dinâmica do sistema, para o passo

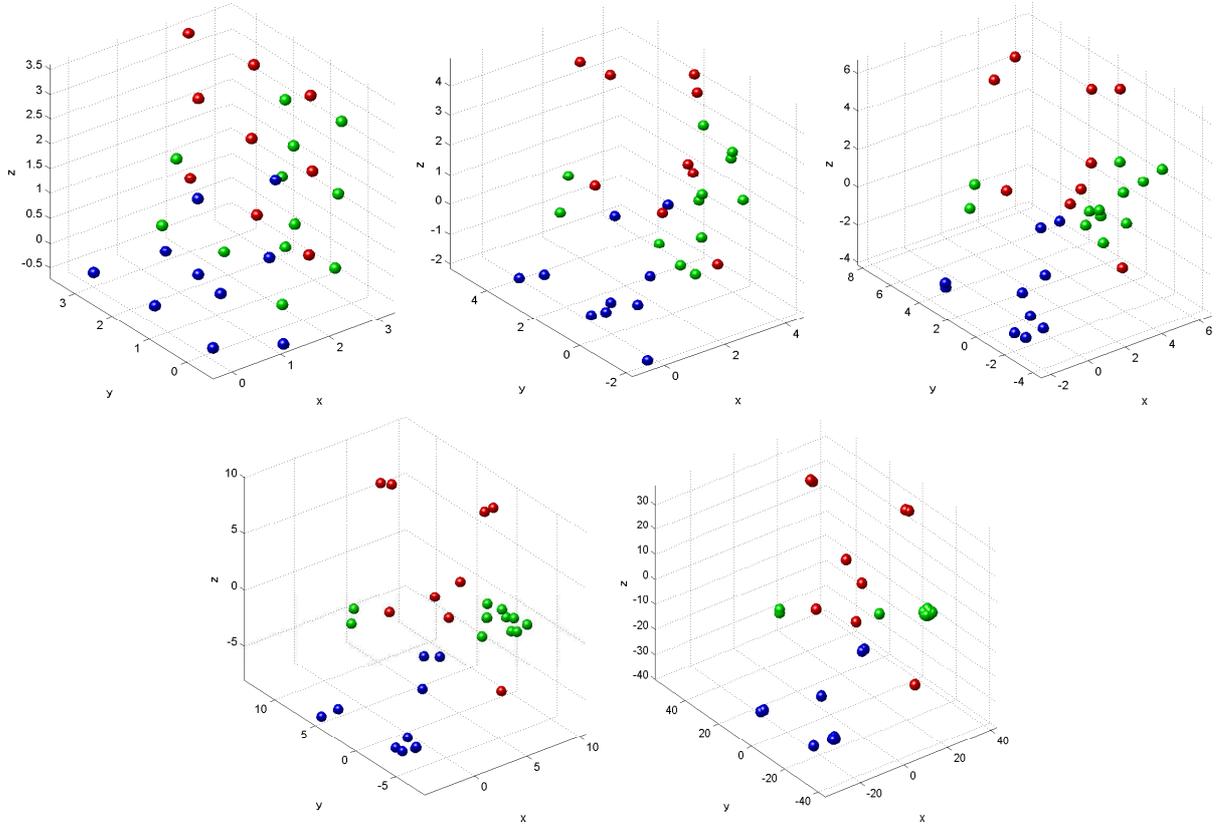


Figura 5.16: Configurações intermédias e final do cenário 3, com passo 10^{-5} ; o intervalo temporal considerado é $t \in [0, 1]$, visualizando-se as posições das partículas ao fim de 1500, 5000, 10000, 20000 e 100000 passos, respectivamente

10^{-5} . Neste cenário foi necessário integrar com um passo mais pequeno, já que o erro na energia para os passos já utilizados, 10^{-3} e 10^{-4} , era indesejável. Nota-se que as partículas que pertencem à mesma «lista» demonstraram uma tendência em «aproximarem-se» umas das outras à medida que a integração decorria; tal pode ser justificado pelo aumento na intensidade do potencial «intra-lista», via aumento do ε associado. A posição de todas as partículas está representada na figura 5.17. Por observação, pode afirmar-se que as partículas se «aproximam» umas das outras; embora não se possa afirmar que cada partícula se aproxima das outras da mesma «lista», já que a cor amarela sinaliza todas as restantes 9 «listas», será de esperar que a tendência exibida pelas 3 «listas» seja partilhada pelas restantes 9.

O erro na energia, para os passos 10^{-3} , 10^{-4} e 10^{-5} , está apresentado na figura 5.18. Para

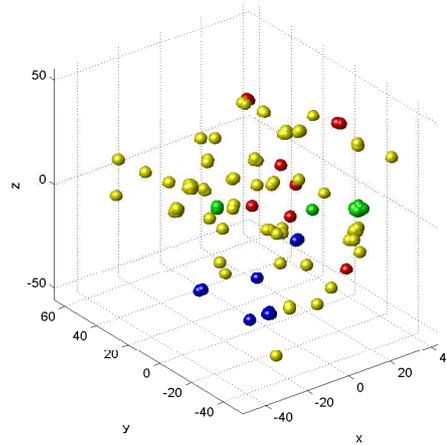


Figura 5.17: Configuração final do cenário 3, com passo 10^{-5} , com a totalidade das partículas

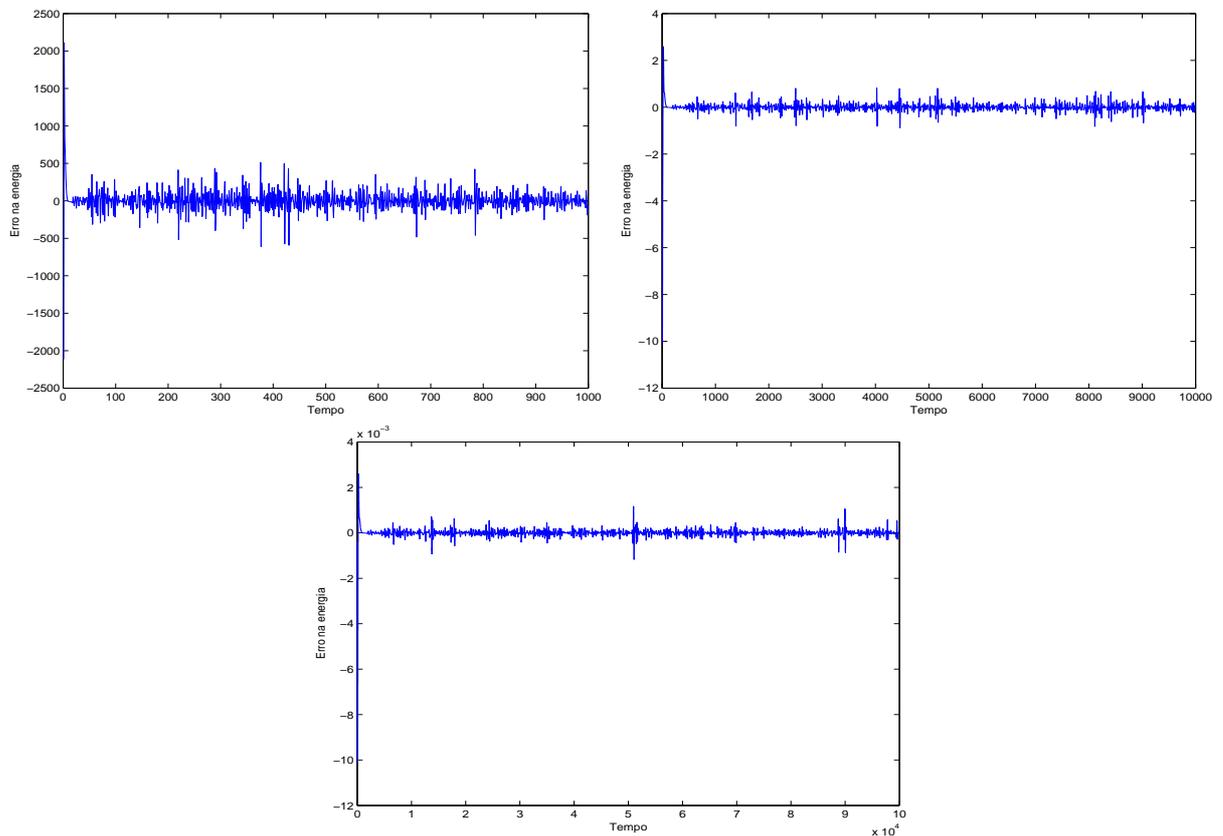


Figura 5.18: Erro na energia do cenário 3, com passo 10^{-3} , 10^{-4} e 10^{-5} , respectivamente, ao longo de toda a simulação

o passo 10^{-3} , o erro na energia é significativo e, por isso, considera-se que os resultados da integração não são aceitáveis. Usando o passo 10^{-4} obtém-se um erro na energia bastante

menor, mas usando o passo 10^{-5} esse erro reduz-se à terceira casa decimal, o que já é aceitável, atendendo a que o valor típico da energia é da ordem de 10^4 (figura 5.20). A figura 5.19 permite uma análise mais detalhada do erro na energia, na segunda metade

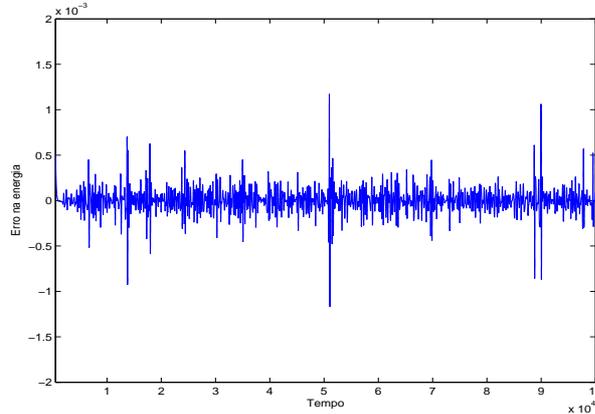


Figura 5.19: Erro na energia do cenário 3, com passo 10^{-5} , a partir do passo 1000

da simulação.

A energia cinética, a energia potencial e a energia total para este passo constam da figura 5.20. A fase de instabilidade no que se refere ao comportamento da energia total é a inicial; após esta fase muito breve, a energia estabiliza, consequência da estabilização das suas parcelas.

A evolução da quantidade de movimento linear é representada na figura 5.21. Pode dizer-se que a quantidade de movimento linear é conservada, uma vez que as suas componentes diferem de zero, o valor inicial, só na décima segunda casa decimal.

Cenário 4

A simulação do sistema foi realizada sob as condições:

- (i) configuração inicial com «listas» e consideração, na função potencial (5.7), de $\varepsilon = 100$ caso as partículas pertençam à mesma «lista» e $\varepsilon = 1$ caso contrário;
- (ii) as partículas que estão na superfície $z = 0.25$ devem permanecer nela (o valor inicial mínimo da componente z é 0.25, de forma que as partículas que estão na superfície $z = 0.25$ correspondem a uma «face» do cubo de simulação);

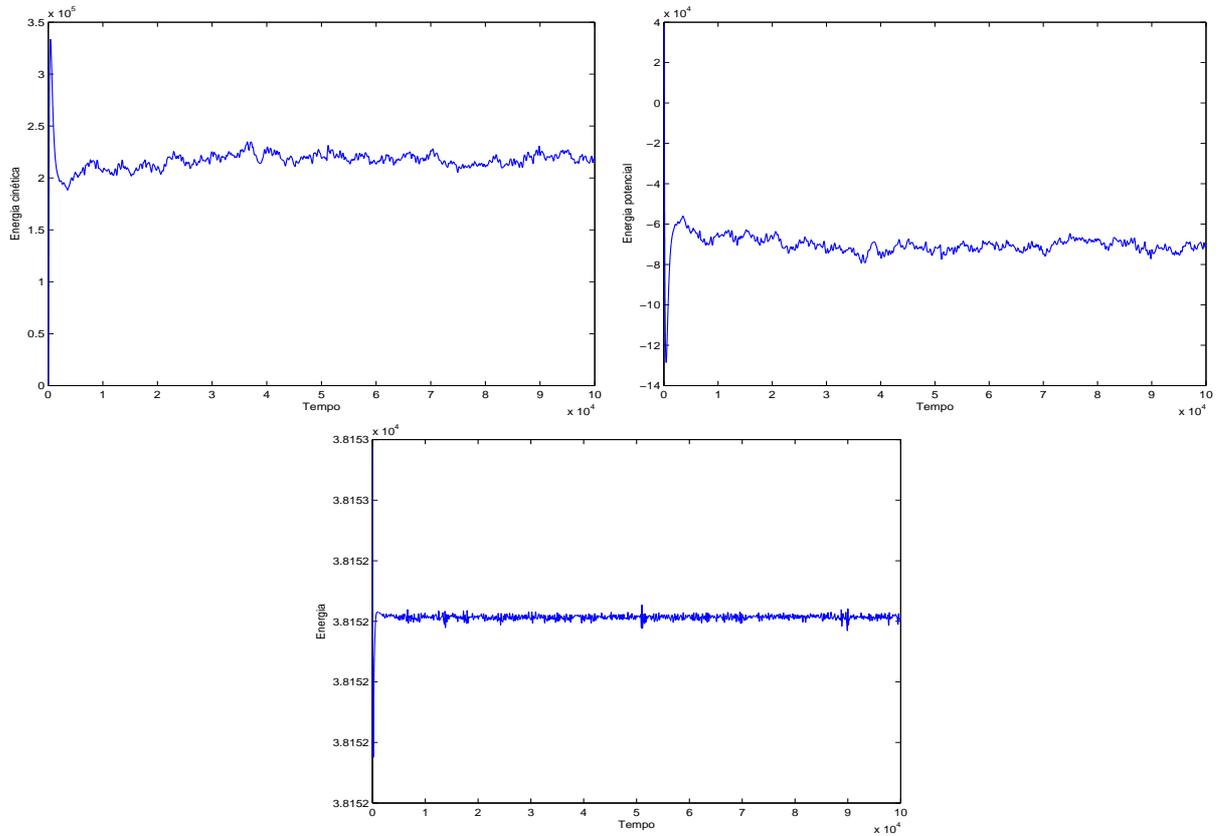


Figura 5.20: Evolução da energia cinética, energia potencial e energia total do cenário 3, com passo 10^{-5}

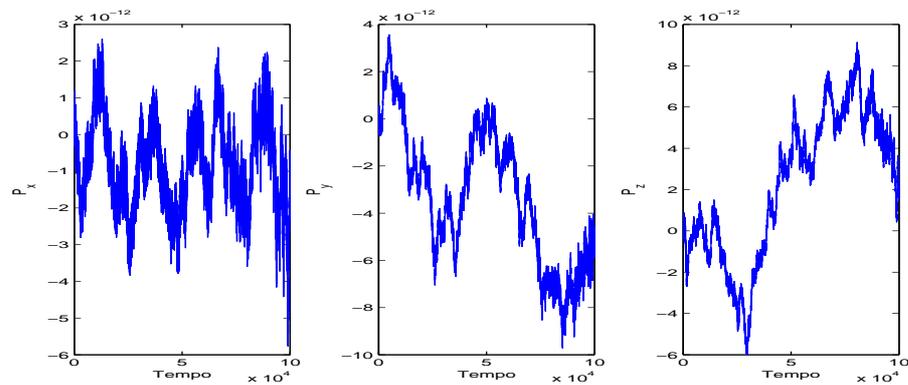


Figura 5.21: Evolução das componentes da quantidade de movimento linear no cenário 3, para o passo 10^{-5}

- (iii) todas as partículas sofrem a ação de uma força externa linear $F(t) = 2t$, no sentido do vector $-\hat{e}_3$.

Neste cenário, o integrador Störmer-Verlet foi adaptado:

1. para que as partículas na superfície $z = 0.25$ se movam somente nessa superfície, impõe-se que a força aplicada às partículas dessa superfície, e que figura nas equações do algoritmo, tenha componente nula no que concerne à componente z ;
2. para aplicar uma carga $F(t) = 2t$ nas partículas, recorre-se à igualdade

$$\mathbf{F}_i^{tot} = \mathbf{F}_i^{int} + \mathbf{F}_i^{ext}, \quad (5.19)$$

tal significa que a força total aplicada numa partícula é composta por duas contribuições: a força interna, que decorre das interações entre as partículas, e a força externa.

Consequentemente, a força que figura no algoritmo não será $f(\mathbf{q}^n)$, mas $f(\mathbf{q}^n, t_n)$; na prática, adiciona-se $-2t\hat{e}_3$ à expressão da força das equações (3.46).

Saliente-se a grande diferença quanto aos cenários anteriores: o sistema deixa de ser isolado já que há uma força externa a actuar no sistema. Em resumo [8]:

1. *Sistema isolado.* Sejam E , \mathbf{P} e \mathbf{L} a energia, a quantidade de movimento linear e a quantidade de movimento angular, respectivamente. Então,

- $\frac{dE}{dt} = 0$;
- $\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mathbf{0}$;
- $\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{0}$.

2. *Sistema não isolado*

- $\frac{dE}{dt} = \mathbf{F}^{ext} \cdot \mathbf{v}$, onde \mathbf{F}^{ext} e \mathbf{v} representam a força externa e a velocidade, respectivamente;
- $\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mathbf{F}^{ext}$;
- $\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{q} \times \mathbf{F}^{ext}$.

A variação de energia do sistema, ao fim de um certo intervalo de tempo $[t_0, t_1]$, é assim dada por:

$$\Delta E = \int_{t_0}^{t_1} \mathbf{F}^{ext} \cdot \frac{d\mathbf{q}}{dt} dt = \int_{q_0}^{q_1} \mathbf{F}^{ext} \cdot d\mathbf{q}. \quad (5.20)$$

Então,

$$\Delta E = W^{ext},$$

isto é, a variação da energia mecânica de um sistema, $E = T + V$, é igual ao trabalho realizado pelas forças exteriores, não incluídas no potencial.

Alguns sistemas físicos são não conservativos, mesmo quando a força deriva de um potencial. Tal acontece quando o potencial e, conseqüentemente, o campo de forças derivados dele, são dependentes explicitamente do tempo. Se

$$V = V(\mathbf{r}, t)$$

então o campo de forças é

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{q}, t) = -\nabla V.$$

O trabalho efectuado pela força que actua na partícula é

$$W = \int_{q_0}^{q_1} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{q} = - \int_{q_0}^{q_1} \nabla V \cdot d\mathbf{q} = - \int_{q_0}^{q_1} \frac{\partial V}{\partial x} dx + \frac{\partial V}{\partial y} dy + \frac{\partial V}{\partial z} dz,$$

mas a integranda já não é igual à diferencial total devido à dependência explícita do tempo. Como a diferencial total de V é agora

$$dV = \frac{\partial V}{\partial x} dx + \frac{\partial V}{\partial y} dy + \frac{\partial V}{\partial z} dz + \frac{\partial V}{\partial t} dt,$$

a integranda no integral acima é igual a $dV - \frac{\partial V}{\partial t} dt$ e, então,

$$W = - \int_{q_0}^{q_1} (dV - \frac{\partial V}{\partial t} dt) = - \int_{q_0}^{q_1} dV + \int_{q_0}^{q_1} \frac{\partial V}{\partial t} dt.$$

Designando o potencial nos pontos q_0 e q_1 por V_0 e V_1 , respectivamente, pode escrever-se

$$W = V_0 - V_1 + \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial V}{\partial t} dt,$$

onde os limites do integral acima foram ajustados, já que a integração é com respeito ao tempo; assume-se que a partícula passa no ponto q_0 no instante t_0 e no ponto q_1 no instante t_1 .

O trabalho efectuado pela força que actua na partícula pode ser escrito como

$$W = T_1 - T_0,$$

onde T_0, T_1 representam a energia cinética da partícula nos pontos q_0, q_1 , respectivamente. Então,

$$T_1 - T_0 = V_0 - V_1 + \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial V}{\partial t} dt$$

ou

$$T_1 + V_1 - (T_0 + V_0) = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial V}{\partial t} dt,$$

ou seja, a soma da energia cinética com a energia potencial já não é constante. A taxa de variação da energia total é igual à derivada parcial do potencial com respeito ao tempo

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial V}{\partial t}.$$

No cenário 4 são integradas numericamente as equações de Newton (5.18), mas \mathbf{F}_i foi substituída pela expressão \mathbf{F}_i^{tot} de (5.19). A Hamiltoniana H é dada por

$$H(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t) = \frac{1}{2} \|\dot{\mathbf{q}}\|^2 + V_{LJ}(\mathbf{q}(t)) + V_{ext}(\mathbf{q}(t), t), \quad (5.21)$$

onde $V_{ext} = 2t \sum_{i=1}^N z_i(t)$, e $\mathbf{q}_i = (x_i \ y_i \ z_i)^T$. Então,

$$\frac{dH}{dt} = \dot{\mathbf{q}}(t) \ddot{\mathbf{q}}(t) + \dot{\mathbf{q}}(t) \frac{\partial V(\mathbf{q}(t))}{\partial \mathbf{q}(t)} + 2 \sum_{i=1}^N z_i(t) + 2t \sum_{i=1}^N \dot{z}_i(t), \quad (5.22)$$

onde $\ddot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{F}^{int}(\mathbf{q}(t)) + \mathbf{F}^{ext}(\mathbf{q}(t))$. Substituindo em (5.22) a expressão da aceleração, conjugada com a definição de força (5.4), resulta

$$\frac{dH}{dt} = 2 \sum_{i=1}^N z_i(t). \quad (5.23)$$

Consequentemente,

$$H(t_1) = H(t_0) + 2 \int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^N z_i(t) dt, \quad (5.24)$$

ou seja,

$$H(t_1) - H(t_0) - 2 \int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^N z_i(t) dt = 0, \quad (5.25)$$

chamada de energia modificada, onde o integral foi aproximado pela regra trapezoidal, ou seja, $\int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^N z_i(t) dt \approx (t_1 - t_0) \sum_{i=1}^N \frac{z_i(t_0) + z_i(t_1)}{2}$.

Neste cenário, devido à presença de uma força externa, integrou-se usando um passo

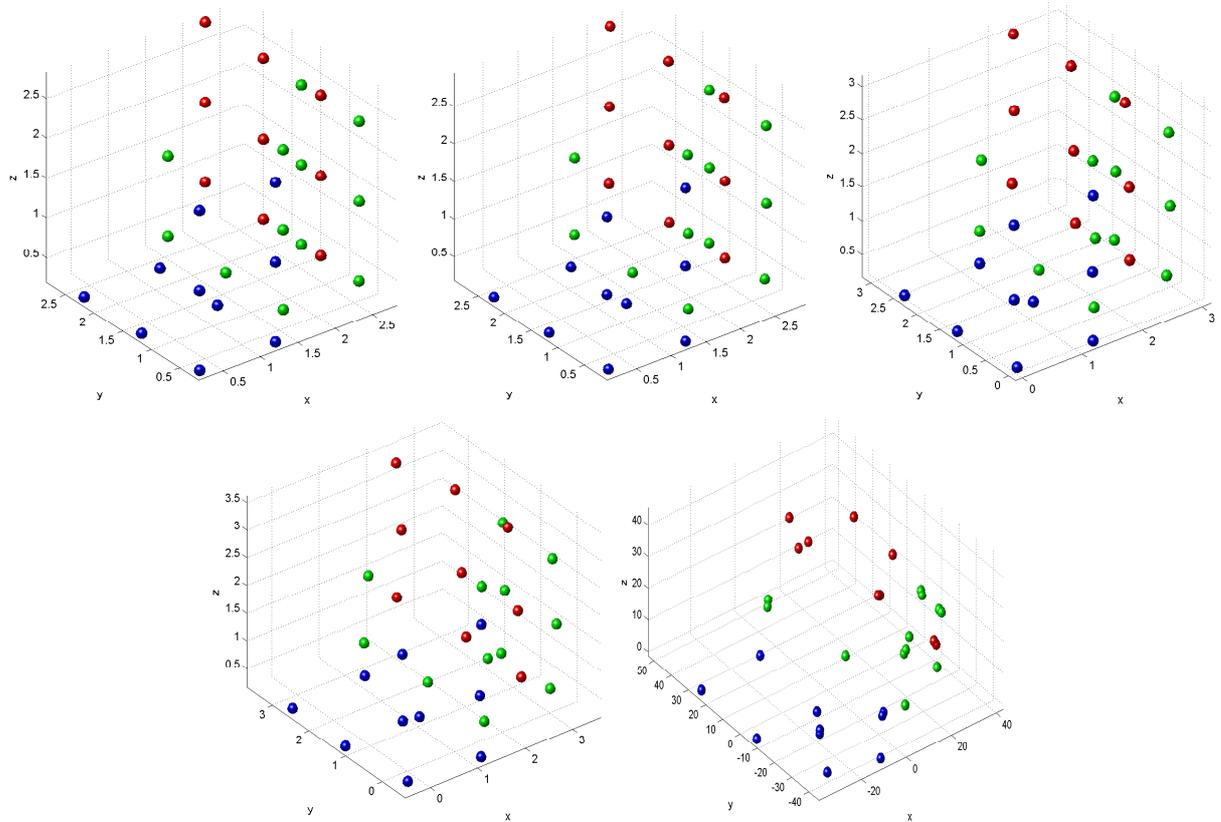


Figura 5.22: Configurações intermédias e final do cenário 4, com passo 10^{-5} ; o intervalo temporal considerado é $t \in [0, 1]$, visualizando-se as posições das partículas ao fim de 1500, 5000, 10000, 20000 e 100000 passos, respectivamente

menor do que nos cenários anteriores, o passo $h = 10^{-5}$. As configurações intermédias e final constam da figura 5.22. Por mera inspeção visual, pode dizer-se que as partículas pertencentes à mesma lista, à medida que a simulação decorria, aproximaram-se umas das outras. Por outro lado, e comparando com o cenário 2, neste cenário 4 as partículas não se moveram com tanta amplitude ao longo da componente z , no sentido negativo; tal poderia ser explicado pela imposição de 18 partículas se manterem na superfície $z = 0.25$, que funcionaria como que uma «parede». A observação da figura 5.23 conduz à mesma conclusão. O erro na energia modificada observável na figura 5.24 tem um padrão semelhante aos cenários anteriores: no início da simulação, verifica-se uma certa «turbulência», seguido de uma fase de estabilização. Apesar disso, o erro máximo é da ordem dos 10^{-4} , valor bastante aceitável. A observação da figura 5.25 fornece uma informação mais detalhada sobre a ordem de grandeza do erro na esmagadora maioria do tempo de simulação; a partir

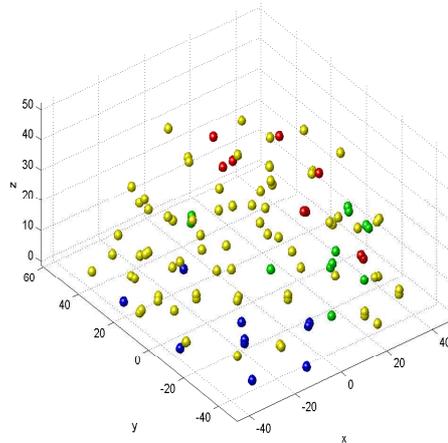


Figura 5.23: Configuração final do cenário 4, com passo 10^{-5} , com a totalidade das partículas

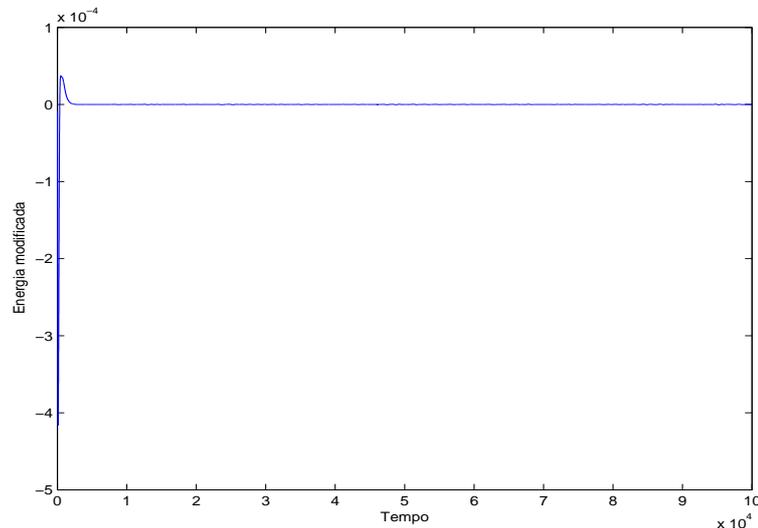


Figura 5.24: Erro na energia modificada no cenário 4, com passo 10^{-5} , respectivamente, ao longo de toda a simulação

do passo 200, o erro é da ordem dos 10^{-6} . O comportamento exibido pela quantidade de movimento linear é o teoricamente esperado. Como a força aplicada é perpendicular ao plano $x0y$, as componentes x e y da quantidade de movimento linear devem conservar-se; somente na componente z essa conservação é quebrada. A visualização da figura 5.26 confirma este facto. Nas duas primeiras componentes da quantidade de movimento linear, constata-se que o seu erro ronda os 10^{-11} , já que a conservação equivale a ter zero nessas componentes. Quanto à componente z , observa-se uma subida brusca na fase inicial da simulação, seguida por uma tendência de descida bastante suave, em comparação com o

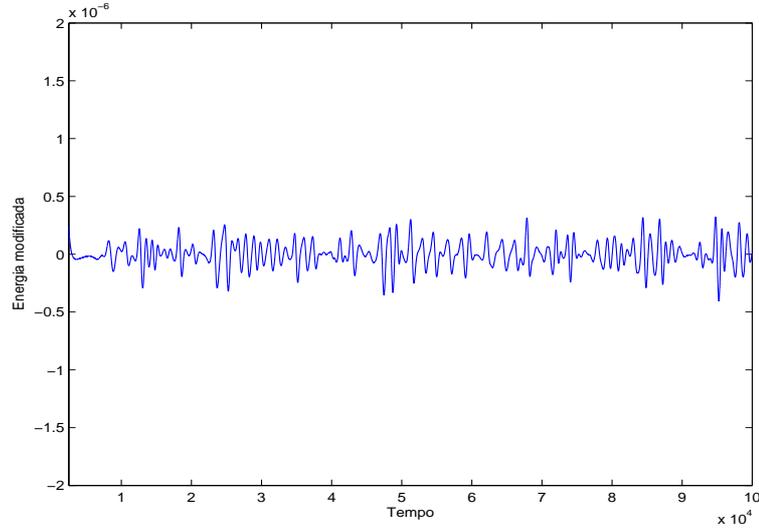


Figura 5.25: Erro na energia modificada do cenário 4, com passo 10^{-5} , respectivamente, a partir do passo 200

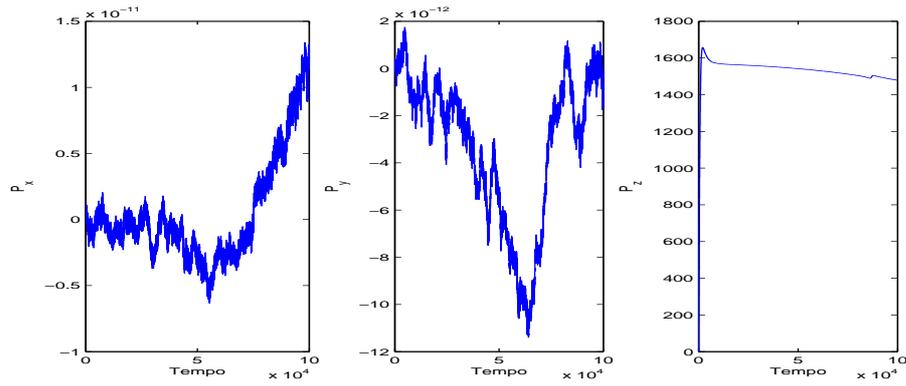


Figura 5.26: Evolução das componentes da quantidade de movimento linear no cenário 4, para o passo 10^{-5}

ritmo inicial de subida. Aliás, tem-se que $\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mathbf{F}^{ext}$, ou seja, $\frac{dP_z}{dt} = -2t$; como a taxa de variação temporal da componente z da quantidade de movimento linear é negativa, seria de esperar que essa componente exibisse uma tendência de descida.

5.7.5 Conclusões

Os resultados obtidos na simulação dos 4 cenários com o integrador geométrico Störmer-Verlet são os esperados. O integrador demonstra um excelente comportamento no longo prazo, tanto no que respeita à conservação da energia como da quantidade de movimento

linear.

Embora este integrador não conserve, exactamente, a energia, fá-lo de forma muito aproximada; no erro da energia observam-se ligeiras oscilações em torno de zero, mas sempre com ordens de grandeza muito pequenas. A quantidade de movimento linear é conservada em todos os casos esperados, com uma precisão a rondar os 10^{-11} .

Esta *performance* do método Störmer-Verlet explica porque motivo é um integrador tão apreciado em aplicações de Dinâmica Molecular.

Capítulo 6

Conclusões

A integração numérica de equações diferenciais deve preservar as características qualitativas do sistema a ser integrado. As características qualitativas a serem preservadas são diversas; a energia, quantidades de movimento, simetrias e symplecticidade são algumas delas.

Os sistemas hamiltonianos constituem um objecto de estudo privilegiado no âmbito da integração geométrica; afinal, muitos sistemas em áreas tão diversas como a Mecânica, a Astronomia e a Dinâmica Molecular são hamiltonianos. Integradores numéricos usados na integração de sistemas hamiltonianos devem ser simplécticos; a symplecticidade é uma das principais características intrínsecas a esses sistemas. Embora não existam, para um passo temporal constante, integradores simplécticos que preservem a energia, a análise *backward* do erro mostra que a energia será quase conservada, oscilando de forma limitada em torno de um valor.

Se a derivação dos integradores numéricos for feita utilizando princípios variacionais, obtêm-se integradores variacionais. A grande vantagem da derivação variacional reside no seguinte: os integradores variacionais preservam a symplecticidade e os invariantes do movimento resultantes do teorema de Noether (por exemplo, as clássicas quantidade de movimento linear e quantidade de movimento angular).

O método de Euler explícito, apesar de muito apelativo por questões de simplicidade, não se inclui na classe dos integradores geométricos. O método de Euler implícito, apesar de permitir o uso de passos temporais maiores do que o método de Euler explícito, já que é incondicionalmente estável, também não se inclui na classe dos integradores geométricos.

O método de Euler simpléctico, tal como o seu nome indica, já pertence a esta classe e, neste sentido, preferível ao explícito e ao implícito.

O método de Euler simpléctico é um método de ordem 1. Por isso, em muitas situações em que se exige precisão, é necessário usar métodos de ordem superior. O método Störmer-Verlet, integrador geométrico de ordem 2, é frequentemente usado em Dinâmica Molecular devido aos excelentes resultados obtidos no longo prazo, quanto ao comportamento da energia e da quantidade de movimento linear, tal como foi observado no capítulo anterior; mas, neste caso, como não se exige uma grande precisão nas trajectórias, a ordem 2 do método é suficiente, adicionando-se-lhe a vantagem de ser um método explícito e de se calcular a força uma única vez por passo.

Em campos nos quais a precisão das trajectórias assume um papel de relevo, é exigível o recurso a integradores de ordem superior. A família Runge-Kutta pode ser a resposta a estas exigências, em particular o método Runge-Kutta Gauss-Legendre. Este método, embora implícito, pode ser usado para sistemas descritos por Hamiltonianas gerais e inclui-se na classe dos integradores geométricos. O método é A -estável, é simpléctico para sistemas hamiltonianos canónicos, preserva todos os primeiros integrais quadráticos e têm ordem 2ν , a máxima ordem para métodos Runge-Kutta com ν etapas.

6.1 Perspectivas de trabalho futuro

O integrador Störmer-Verlet foi usado numa simulação num problema no âmbito da Dinâmica Molecular. A simulação deste problema pode ser enriquecida e/ou modificada:

1. pelo uso de condições fronteira periódicas, caso se remova a imposição do movimento das partículas que estão inicialmente numa dada superfície a essa mesma superfície.
2. por usar as listas sugeridas por Verlet e o uso do potencial de Lennard-Jones (5.9).
3. por calcular grandezas macroscópicas, tais como a temperatura e a pressão.
4. por comparar os resultados obtidos com o método Störmer-Verlet com outros integradores, geométricos e não geométricos.
5. por aumentar o número de partículas do sistema a simular.

Para aumentar o número de partículas do sistema a simular e/ou para usar integradores implícitos será necessário ter ao dispor recursos computacionais convenientes.

Apêndice A

Abordagem geométrica da mecânica

Este apêndice relembra alguns conceitos fundamentais para compreender a abordagem geométrica da mecânica lagrangiana e hamiltoniana. Numa primeira fase, abordam-se as formas externas e as formas diferenciais; de seguida, aplicam-se estes conceitos na compreensão das variedades simplécticas vs. mecânica hamiltoniana e lagrangiana; numa fase posterior, sumarizam-se algumas noções sobre grupos e álgebras de Lie, por forma a compreender a abordagem geométrica das funções quantidade de movimento.

A.1 Formas externas

Nesta secção faz-se uma breve abordagem das formas externas: de grau 1, de grau 2 e de grau k . Para cada forma é apresentado o significado geométrico e um exemplo; por fim, são relembrados os conceitos de produto externo, suas propriedades e as funções *pushforward* e *pullback*.

1. Chama-se forma de grau 1 (1-forma) a uma função linear de um vector, $\omega : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, tal que

$$\omega(\lambda_1 \boldsymbol{\xi}_1 + \lambda_2 \boldsymbol{\xi}_2) = \lambda_1 \omega(\boldsymbol{\xi}_1) + \lambda_2 \omega(\boldsymbol{\xi}_2), \quad \forall \lambda_i \in \mathbb{R} \quad \forall \boldsymbol{\xi}_i \in \mathbb{R}^n, \quad i = 1, 2.$$

2. Chama-se forma externa de grau 2 (2-forma) a uma função de um par de vectores, $\omega^2 : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, bilinear e anti-simétrica:

$$\omega^2(\lambda_1 \boldsymbol{\xi}_1 + \lambda_2 \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}_3) = \lambda_1 \omega^2(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_3) + \lambda_2 \omega^2(\boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}_3)$$

$$\omega^2(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2) = -\omega^2(\boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}_1),$$

para todo o $\lambda_i \in \mathbb{R}$, $\boldsymbol{\xi}_i \in \mathbb{R}^n$, $i = 1, 2$. Um exemplo de uma 2-forma é a área orientada $S(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2)$ do paralelogramo construído com base nos vectores $\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2$, do plano euclídeo orientado \mathbb{R}^2 :

$$S(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2) = \begin{vmatrix} \xi_{11} & \xi_{12} \\ \xi_{21} & \xi_{22} \end{vmatrix},$$

onde $\boldsymbol{\xi}_1 = \xi_{11}\mathbf{e}_1 + \xi_{12}\mathbf{e}_2$, $\boldsymbol{\xi}_2 = \xi_{21}\mathbf{e}_1 + \xi_{22}\mathbf{e}_2$ e $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ é a base que fornece a orientação de \mathbb{R}^2 .

Para qualquer 2-forma ω^2 em \mathbb{R}^n é válida a igualdade

$$\omega^2(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}) = 0, \quad \forall \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^n, \tag{A-1}$$

o que é evidente, devido à anti-simetria $\omega^2(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}) = -\omega^2(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi})$.

3. Chama-se forma externa de grau k (k -forma) a uma função de k vectores, a qual é k -linear e anti-simétrica.

O volume orientado de um paralelepípedo com aresta $\boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_k$, no espaço euclídeo orientado \mathbb{R}^k é uma k -forma:

$$V(\boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_k) = \begin{vmatrix} \xi_{11} & \cdots & \xi_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ \xi_{k1} & \cdots & \xi_{kk} \end{vmatrix},$$

onde $\boldsymbol{\xi}_i = \xi_{i1}\mathbf{e}_1 + \cdots + \xi_{ik}\mathbf{e}_k$ e $(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k)$ é uma base em \mathbb{R}^k .

4. O produto externo $\omega_1 \wedge \omega_2$ de duas 1-forma ω_1, ω_2 é a 2-forma que, para cada par de vectores $\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2 \in \mathbb{R}^n$ fornece a área orientada da imagem de um paralelogramo de lados $\boldsymbol{\xi}_1$ e $\boldsymbol{\xi}_2$ no plano ω_1, ω_2 :

$$(\omega_1 \wedge \omega_2)(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2) = \begin{vmatrix} \omega_1(\boldsymbol{\xi}_1) & \omega_2(\boldsymbol{\xi}_1) \\ \omega_1(\boldsymbol{\xi}_2) & \omega_2(\boldsymbol{\xi}_2) \end{vmatrix}.$$

5. O resultado do produto externo de uma k -forma ω^k e uma l -forma ω^l , $\omega^k \wedge \omega^l$, é uma $(k + l)$ -forma. Esta operação goza das seguintes propriedades:

- Anticomutatividade

$$\omega^k \wedge \omega^l = (-1)^{kl} \omega^l \wedge \omega^k$$

- Distributividade

$$(\lambda_1 \omega_1^k + \lambda_2 \omega_2^k) \wedge \omega^l = \lambda_1 \omega_1^k \wedge \omega^l + \lambda_2 \omega_2^k \wedge \omega^l$$

- Associatividade

$$(\omega^k \wedge \omega^l) \wedge \omega^m = \omega^k \wedge (\omega^l \wedge \omega^m).$$

A demonstração destas propriedades pode ser encontrada, por exemplo, em [1].

6. Seja $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função C^∞ e ω^k uma k -forma externa em \mathbb{R}^n . Então, em \mathbb{R}^m surge uma k -forma

$$f^* \omega^k$$

cujos valores nos k vectores $\xi_1, \dots, \xi_k \in \mathbb{R}^m$ é igual ao valor nas suas imagens:

$$(f^* \omega^k)(\xi_1, \dots, \xi_k) = \omega^k(f\xi_1, \dots, f\xi_k).$$

Este procedimento designa-se por *pullback* da forma diferencial: f^* é um operador linear do espaço das k -formas em \mathbb{R}^n para o espaço das k -formas em \mathbb{R}^m . Mostra-se que $f^* \omega^k$ é, também, uma forma externa.

Se $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$, então $(g \circ f)^* = f^* \circ g^*$.

Também se verifica a igualdade $f^*(\omega^k \wedge \omega^l) = (f^* \omega^k) \wedge (f^* \omega^l)$.

O *pushforward* da forma bilinear relaciona-se com o *pullback* da seguinte forma

$$f_* \omega^k = (f^{-1})^* \omega^k,$$

admitindo que f é um difeomorfismo.

Fazendo uma síntese das operações *pullback* e *pushforward* com funções, campos vectoriais e formas bilineares:

- (i) *pullback* de uma função: $\varphi^* f = f \circ \varphi$.
- (ii) *pushforward* de uma função: $\varphi_* g = g \circ \varphi^{-1}$.

(iii) *pushforward* de um campo vectorial X por φ :

$$(\varphi_*X)(\varphi(z)) = D\varphi(z) \cdot X(z);$$

em componentes:

$$(\varphi_*X)^I = \frac{\partial \varphi^I}{\partial z^J} X^J.$$

(iv) *pullback* de um campo vectorial Y por φ : $\varphi^*Y = (\varphi^{-1})_*Y$.

(v) *pullback* de uma forma bilinear ω^2 origina uma forma bilinear $\varphi^*\omega^2$ que depende do ponto $z \in Z$:

$$(\varphi^*\omega^2)_z(z_1, z_2) = \omega^2(D\varphi(z) \cdot z_1, D\varphi(z) \cdot z_2);$$

em componentes:

$$(\varphi^*\omega^2)_{IJ} = \frac{\partial \varphi^K}{\partial z^I} \frac{\partial \varphi^L}{\partial z^J} \omega_{KL}^2;$$

(vi) *pushforward* de uma forma bilinear ω^2 por φ : $\varphi_*\omega^2 = (\varphi^{-1})^*\omega^2$.

A.2 Formas diferenciais

Nesta subsecção faz-se uma breve síntese dos conceitos de 1-forma diferencial e de k -forma diferencial; de seguida, indica-se como descrever univocamente tais formas diferenciais, escolhido o sistema de coordenadas (x_1, \dots, x_n) e, por fim, introduz-se o conceito de derivada externa e algumas propriedades dessa operação.

1. Chama-se forma diferencial de ordem 1 (1-forma) na variedade Q a uma aplicação $\omega : TQ \rightarrow \mathbb{R}$, linear em cada espaço tangente TQ_x , do fibrado tangente da variedade Q .

O exemplo mais simples de uma forma diferencial é a diferencial de uma função. Seja $f : Q \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferencial definida na variedade Q . A diferencial da função f , no ponto x , é uma aplicação linear $df_x : TQ_x \rightarrow \mathbb{R}$, definida no espaço tangente a Q no ponto x . Generalizando a todos os pontos da variedade, diz-se que a diferencial da função f na variedade Q é uma aplicação suave do fibrado tangente TQ em \mathbb{R} , $df : TQ \rightarrow \mathbb{R}$ (relembre-se que $TQ = \bigcup_x TQ_x$).

2. Considere-se uma 1-forma diferencial ω arbitrária em \mathbb{R}^n . Em cada ponto x , essa 1-forma decompõe-se, univocamente na base dx_1, \dots, dx_n . Dito de outra forma, qualquer 1-forma diferencial no espaço \mathbb{R}^n , com o sistema de coordenadas escolhido (x_1, \dots, x_n) , é univocamente descrita como

$$\omega = a_1(x)dx_1 + \dots + a_n(x)dx_n,$$

onde os coeficientes $a_i(x)$ são funções suaves.

3. A quantidade $\omega^k|_x$, no ponto x da variedade Q é uma k -forma externa no espaço tangente TQ_x a Q em x , ou seja, uma função anti-simétrica k -linear dos k vectores ξ_1, \dots, ξ_k tangentes a M em x .

Pode dizer-se que a k -forma em Q é uma aplicação que associa a cada ponto x uma k -forma externa em TQ_x «que depende de x de forma diferenciável».

4. Qualquer k -forma diferencial no espaço \mathbb{R}^n , com um sistema de coordenadas escolhido (x_1, \dots, x_n) , é univocamente descrita como

$$\omega^k = \sum_{i_1 < \dots < i_k} a_{i_1 \dots i_k}(x) dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k},$$

onde $a_{i_1 \dots i_k}(x)$ são funções suaves em \mathbb{R}^n .

5. Seja f uma 0-forma, isto é, uma função diferenciável; o seu diferencial é a 1-forma:

$$df = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i.$$

Para generalizar este processo usa-se a derivada exterior: transforma k -formas em $(k+1)$ -formas. Considere-se a 1-forma $\omega = \sum f_i dx_i$ em \mathbb{R}^3 ; a sua derivada exterior é uma 2-forma

$$d\omega = \sum df_i \wedge dx_i.$$

Por exemplo, seja $\omega = f_1 dx_1 + f_2 dx_2 + f_3 dx_3$. A sua derivada exterior é dada por

$$d\omega = \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1} - \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right) dx_1 dx_2 + \left(\frac{\partial f_3}{\partial x_1} - \frac{\partial f_1}{\partial x_3} \right) dx_1 dx_3 + \left(\frac{\partial f_3}{\partial x_2} - \frac{\partial f_2}{\partial x_3} \right) dx_2 dx_3.$$

Como exemplo suplementar, considerem-se as funções reais f e g em \mathbb{R}^2 . Então,

$$df \wedge dg = \begin{vmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial g}{\partial x} & \frac{\partial g}{\partial y} \end{vmatrix} dx dy.$$

6. Sejam f e g funções e ω e ψ 1-formas. Então:

$$(i) \quad d(fg) = dfg + fdg.$$

$$(ii) \quad d(f\omega) = df \wedge \omega + fd\omega.$$

(iii) $d(\omega \wedge \psi) = d\omega \wedge \psi - \omega \wedge d\psi$. No caso genérico de ω ser uma k -forma e ψ uma 1-forma, vem

$$d(\omega \wedge \psi) = d\omega \wedge \psi + (-1)^k \omega \wedge d\psi.$$

(iv) $d^2(\omega) = d(d\omega) = 0$, para qualquer k -forma

$$(v) \quad d(\omega + \psi) = d\omega + d\psi.$$

A derivada exterior comuta com a operação *pullback*, ou seja,

$$d(f^*\omega^k) = f^*(d\omega^k),$$

onde ω^k é uma k -forma numa variedade N e $f : M \rightarrow N$ uma função suave entre variedades.

Como exemplo globalizante, considere-se $\omega = xydx + x^2dz$. Então,

$$\begin{aligned} d\omega &= d(xy) \wedge dx + d(x^2) \wedge dz \\ &= (ydx + xdy) \wedge dx + 2xdx \wedge dz \\ &= -xdx \wedge dy + 2xdx \wedge dz. \end{aligned}$$

Um outro exemplo elucidativo é o que se segue. Seja $\omega = xyzdx + yzdy + (x + z)dz$. Então,

$$\begin{aligned} d\omega &= d(xyz) \wedge dx + d(yz) \wedge dy + d(x + z) \wedge dz \\ &= (yzdx + xzdy + xydz) \wedge dx + (zdy + ydz) \wedge dy + (dx + dz) \wedge dz \\ &= -xzdx \wedge dy + (1 - xy)dx \wedge dz - ydy \wedge dz. \end{aligned}$$

Uma k -forma ω diz-se fechada se $d\omega = 0$ e exacta se existir uma $(k - 1)$ -forma β tal que $\omega = d\beta$. Mostra-se que toda a k -forma exacta é fechada [26]; no entanto, existem k -formas fechadas que não são exactas.

A.3 Variedades simplécticas e sistemas hamiltonianos

Nesta subsecção traduz-se em linguagem de geometria diferencial a teoria hamiltoniana. A compreensão do funcionamento dos sistemas hamiltonianos deve ser alcançada, quer se utilize linguagem de cariz geométrico, quer instrumentos de análise de outras áreas.

Seja Q^{2n} uma variedade diferenciável de dimensão par. O par (Q^{2n}, ω^2) designa-se por variedade simpléctica se Q^{2n} tiver uma estrutura simpléctica:

1. a 2-forma ω^2 é fechada - significa que $d\omega^2 = 0$;
2. a 2-forma ω^2 é não degenerada - significa que $\forall \xi \neq \mathbf{0} \exists \eta : \omega^2(\xi, \eta) \neq 0$, onde $\xi, \eta \in TQ$.

A não degenerescência da 2-forma pode ser reescrita da seguinte forma: se $\omega^2(\xi, \eta) = 0$ para todo o $\eta \in TQ$, então $\xi = \mathbf{0}$.

Exemplos de variedades simplécticas são enumerados em [1, 26], nomeadamente:

- (a) o par $(\mathbb{R}^{2n}, \omega^2)$, onde o espaço tem coordenadas (p_i, q^i) e $\omega^2 = \sum dp_i \wedge dq^i$.
- (b) o par $(S^1 \times \mathbb{R}, \omega^2)$, com coordenadas (θ, p) , e $\omega^2 = d\theta \wedge dp$.
- (c) o par (\mathbb{T}^2, ω^2) , com coordenadas (θ, φ) , e $\omega^2 = d\theta \wedge d\varphi$.
- (d) o par (S^2, ω^2) , onde r representa o raio, e o elemento de área dado por $\omega^2 = r^2 \sin \theta d\theta \wedge d\varphi$.

A relevância das variedades simplécticas na mecânica hamiltoniana é a seguinte. Seja Q uma variedade diferenciável n -dimensional. Uma 1-forma no espaço tangente a Q , no ponto x , chama-se vector cotangente a Q , nesse ponto. O conjunto de todos os vectores cotangentes a Q , no ponto x , chama-se espaço cotangente à Q nesse ponto, e representa-se por T^*Q_x . A reunião dos espaços cotangentes a Q em todos os seus pontos designa-se por fibrado cotangente de Q , representando-se por T^*Q . Então, um ponto de T^*Q é uma 1-forma no espaço tangente a V , num ponto qualquer de V . Diz-se que o espaço T^*Q é dual do espaço TQ .

A função $r : TQ \rightarrow Q$, que faz corresponder a cada vector ξ o ponto $\mathbf{x} \in Q$, onde o vector

ξ é tangente a Q ($\xi \in TQ_x$) chama-se projecção natural. Analogamente, existe uma projecção natural $p : T^*Q \rightarrow Q$, que contrapõe a cada 1-forma em TQ_x um ponto \mathbf{x} .

Em muitos problemas mecânicos, o espaço de fase é o fibrado cotangente T^*Q ao espaço das configurações Q . O fibrado cotangente é dotado de uma estrutura simpléctica. Assuma-se que Q é N -dimensional e escolham-se as coordenadas locais (q^1, \dots, q^n) neste espaço; como (dq^1, \dots, dq^n) é uma base de T^*Q pode escrever-se qualquer $\alpha \in T^*Q$ como $\alpha = p_i dq^i$. Este procedimento define as coordenadas locais $(q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n)$ em T^*Q . Define-se a forma canónica simpléctica em T^*Q por

$$\omega^2 = dq^i \wedge dp_i, \tag{A-2}$$

que é uma 2-forma fechada e independente da escolha de coordenadas (q^1, \dots, q^n) . O teorema que se segue sintetiza o que foi descrito [1].

Teorema A.1. *O fibrado cotangente T^*Q tem uma estrutura simpléctica natural. Nas coordenadas locais (p_i, q^i) , esta estrutura simpléctica é dada pela expressão*

$$\omega^2 = \sum dp_i \wedge dq^i = dp_1 \wedge dq^1 + \dots dp_n \wedge dq^n.$$

Considerando em T^*Q a 1-forma

$$\omega^1 = \mathbf{p} \, d\mathbf{q}, \tag{A-3}$$

verifica-se que $\omega^2 = -d\omega^1$, ou seja, a 2-forma fechada ω^2 é não degenerada. A relação entre esta 1-forma ω^1 e a 2-forma ω^2 é apresentada no teorema que se segue [26].

Teorema A.2. *No caso dimensional finito, a 2-forma simpléctica ω^2 é dada pela expressão $\omega^2 = \sum dq^i \wedge dp_i$. A 1-forma associada é dada por $\omega^1 = p_i dq^i$, verificando-se a relação*

$$\omega^2 = -d\omega^1. \tag{A-4}$$

A igualdade (A-4) obtém-se da seguinte forma:

$$-d\omega^1 = -d(p_i dq^i) = dq^i \wedge dp_i = \omega^2.$$

A transformação de Legendre, $T_L : TQ \rightarrow T^*Q$, permite obter a 1-forma ω^1 e a 2-forma ω^2 no espaço TQ , pelo recurso à operação *pullback*, fazendo

$$\omega_L^1 = T_L^* \omega^1 \quad \text{e} \quad \omega_L^2 = T_L^* \omega^2.$$

A 1-forma ω_L^1 chama-se 1-forma lagrangiana e a 2-forma ω_L^2 designa-se por 2-forma lagrangiana; ω_L^1 e ω_L^2 estão relacionadas pela expressão

$$\omega_L^2 = -d\omega_L^1, \quad (\text{A-5})$$

já que a operação derivada exterior comuta com a operação *pullback*. Quais as expressões destas formas diferenciais em TQ ? Em dimensão finita, têm-se [26]

$$\omega_L^1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} dq^i \quad (\text{A-6})$$

e

$$\omega_L^2 = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j} dq^i \wedge dq^j + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j} dq^i \wedge d\dot{q}^j, \quad (\text{A-7})$$

onde se subentende a soma em i e em j .

A 1-forma ω^1 lagrangiana e hamiltoniana estão relacionadas pela expressão

$$\omega_L^1 = (T_L)^* \omega^1,$$

ao passo que as 2-formas relacionam-se através de

$$\omega_L^2 = (T_L)^* \omega^2.$$

A 1-forma ω_L^1 pode ser derivada a partir de princípios variacionais. Quando se derivam as equações de Euler-Lagrange remove-se a condição dos extremos $\delta q(a) = \delta q(b) = 0$, mantendo-se o intervalo temporal fixo (a, b) . Considere-se a acção

$$A = \int_a^b L \left((q^i(t), \frac{dq^i}{dt}(t)) \right) dt.$$

O princípio variacional de Hamilton procura curvas $\mathbf{q}(t)$ para as quais a acção é estacionária sob variações de $q^i(t)$, com pontos extremos fixos e para um intervalo temporal fixo. Com estes pressupostos, obtém-se

$$\int_a^b \delta q^i \left(\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) dt + \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta q^i \right|_a^b.$$

Na derivação feita das equações de Euler-Lagrange (2.4), o último termo

$$\left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta q^i \right|_a^b \quad (\text{A-8})$$

anula-se, já que $\delta\mathbf{q}(a) = \delta\mathbf{q}(b) = 0$. Mas, o que acontece se essa condição não se verificar, mas apenas a do intervalo temporal ser fixo? O termo (A-8) não tem, necessariamente, de se anular, mas passa a ser uma função de q^i e \dot{q}^i , com o vector tangente δq^i ; tal função pode ser considerada uma 1-forma em TQ , em particular a 1-forma $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} dq^i$.

Teorema A.3. *Dado uma Lagrangiana L , de ordem C^k , $k \geq 2$, existe uma única função $D_{ELL} : \ddot{Q} \rightarrow T^*Q$, de ordem C^{k-2} , definida na subvariedade*

$$\ddot{Q} = \left\{ \frac{d^2\mathbf{q}}{dt^2}(0) \in T(TQ) : \mathbf{q} \text{ é uma curva } C^2 \text{ em } Q \right\}$$

de $T(TQ)$, e uma única 1-forma ω_L^1 , de ordem C^{k-1} em TQ , tal que para todas as variações $\mathbf{q}_\epsilon(t)$ de ordem C^2 , para um intervalo temporal fixo, onde $\mathbf{q}_0(t) = \mathbf{q}(t)$, se tem

$$dA(q(\cdot)) \cdot \delta\mathbf{q}(\cdot) = \int_a^b D_{ELL} \left(\frac{d^2\mathbf{q}}{dt^2} \right) \cdot \delta\mathbf{q} dt + \omega_L^1 \left(\frac{d\mathbf{q}}{dt} \right) \cdot \hat{\delta}\mathbf{q} \Big|_a^b, \quad (\text{A-9})$$

onde

$$\delta\mathbf{q}(t) = \frac{d}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} \mathbf{q}_\epsilon(t), \quad \hat{\delta}\mathbf{q}(t) = \frac{d}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} \frac{d}{dt} \mathbf{q}_\epsilon(t).$$

A 1-forma assim definida designa-se por 1-forma lagrangiana.

Um campo vectorial lagrangiano, $X_L : TQ \rightarrow T(TQ)$, satisfaz a equação

$$D_{ELL} \circ X_L = 0, \quad (\text{A-10})$$

e o fluxo lagrangiano $\psi_L : TQ \times \mathbb{R} \rightarrow TQ$ é o fluxo de X_L . Para uma Lagrangiana arbitrária, a equação (A-10) pode não definir, de forma única, o campo vectorial X_L e por isso a função fluxo ψ_L pode não existir. Mostra-se que, dado a Lagrangiana $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$, o campo vectorial lagrangiano X_L e o seu fluxo ψ_L estão bem definidos se e só se a Lagrangiana L for regular [27].

Uma Lagrangiana L é regular se a matriz $[\partial^2 L / \partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j]$ for não singular. Se a transformada de Legendre for um difeomorfismo, então a Lagrangiana é hiperregular. Se L for regular, os princípios variacionais originam equações diferenciais ordinárias de segunda ordem independentes das coordenadas.

Os campos vectoriais lagrangiano e hamiltoniano estão relacionados pela expressão

$$X_L = (T_L)^* X_H,$$

e os respectivos fluxos pela expressão

$$\psi_L = (T_L)^{-1} \circ \psi_H \circ T_L.$$

Considere-se a transformada de Legendre $T_H : T^*Q \rightarrow TQ$ definida por

$$T_H : (\mathbf{q}, \mathbf{p}) \mapsto (\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \left(\mathbf{q}, \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \right).$$

Diz-se que a Hamiltoniana H é regular se T_H for um isomorfismo local, e hiperregular se for um isomorfismo global.

[26] mostra que os fluxos lagrangianos são simplécticos usando formas diferenciais, nomeadamente a equação (A-9). Considere-se a restrição de A ao subespaço C_L das soluções do princípio variacional. Para $\mathbf{v}_q \in TQ$, associa-se a curva integral $s \mapsto \psi_s(\mathbf{v}_q)$, $s \in [0, t]$, sendo ψ_t a representação do fluxo. Seja a acção

$$A_t = \int_0^t L(\psi_s(\mathbf{v}_q)) ds.$$

Então, $dA_t/dt = L(\psi_t(\mathbf{v}_q))$. Usando a equação (A-9), obtém-se

$$dA_t(\mathbf{v}_q) \cdot \mathbf{w}_{v_q} = \omega_L^1(\psi_t(\mathbf{v}_q)) \cdot \frac{d}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} \psi_t(\mathbf{v}_q + \epsilon \mathbf{w}_{v_q}) - \omega_L^1(\mathbf{v}_q) \cdot \mathbf{w}_{v_q}, \quad (\text{A-11})$$

onde $\epsilon \mapsto \mathbf{v}_q + \epsilon \mathbf{w}_{v_q}$ representa a curva em \mathbf{v}_q , com derivada \mathbf{w}_{v_q} . É de salientar que o primeiro termo do segundo membro da equação (A-9) é nulo, uma vez que a acção está restrita a C_L . A equação (A-11) pode ser escrita como

$$dA_t = (\psi_t)^* \omega_L^1 - \omega_L^1. \quad (\text{A-12})$$

Aplicando a derivada exterior à equação (A-12), obtém-se a simplecticidade do fluxo, ou seja,

$$0 = ddA_t = d((\psi_t)^* \omega_L^1 - \omega_L^1) = -(\psi_t)^* \omega_L^2 + \omega_L^2,$$

a qual é equivalente a

$$(\psi_t)^* \omega_L^2 = \omega_L^2.$$

Quando se usam princípios variacionais, a equação análoga à simplecticidade do fluxo é $d^2 = 0$, aplicada à acção restrita ao espaço das soluções do princípio variacional.

A estrutura simpléctica estabelece um isomorfismo entre o espaço dos vectores tangente e o das 1-formas. Seja I o isomorfismo $I : T^*Q_x \rightarrow TQ_x$, construído conforme se segue. Faça-se corresponder à 1-forma ω_ξ^1 em T^*Q_x ao vector ξ , tangente à variedade simpléctica (Q^{2n}, ω^2) , no ponto x , pela expressão

$$\omega_\xi^1(\eta) = \omega^2(\eta, \xi) \quad \forall \eta \in TQ_x.$$

Agora, considere-se H uma função na variedade simpléctica Q^{2n} . Então, dH é uma 1-forma diferencial em Q , à qual corresponde um determinado vector tangente a Q . Desta forma, obtém-se em Q o campo vectorial $I dH$. O campo vectorial $I dH$ chama-se campo vectorial hamiltoniano, sendo H a função de Hamilton. Por exemplo, se $Q^{2n} = \mathbb{R}^{2n} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$, obtém-se o campo da velocidade de fase das equações canónicas de Hamilton

$$\dot{x} = I dH(x) \Leftrightarrow \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}, \quad \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}$$

[1] mostra o teorema que se segue.

Teorema A.4. *O fluxo de fase hamiltoniano ψ_H conserva a estrutura simpléctica:*

$$(\psi_H)^* \omega^2 = \omega^2.$$

Quando $n = 1$, $Q^{2n} = \mathbb{R}^2$, este teorema indica que o fluxo conserva a área. Este teorema corresponde, naturalmente, ao teorema 2.4. Neste momento, já é possível apresentar o teorema relativo à conservação de energia, utilizando formas diferenciais.

Teorema A.5. *A função H é uma invariante do fluxo de fase hamiltoniano, sendo H a função de Hamilton.*

A derivada de H , segundo a direcção do vector η , é igual ao valor de dH no vector η . Por definição do campo hamiltoniano, tem-se que $\eta = I dH$ e, então

$$dH(\eta) = \omega^2(\eta, I dH) = \omega^2(\eta, \eta) = 0.$$

O teorema seguinte é o análogo do teorema 2.5 [26].

Teorema A.6. *O fluxo ψ de um campo vectorial consiste nas transformações simpléticas, ou seja, para cada t , tem-se $(\psi_t)^*\omega^2 = \omega^2$ se e só se o campo vectorial for localmente hamiltoniano.*

Por exemplo, um campo vectorial constante no toro \mathbb{T}^2 é um campo vectorial localmente hamiltoniano, mas não o é globalmente [26].

A.4 As funções quantidade de movimento

Os conceitos clássicos do momento linear e do momento angular podem ser generalizados; essa generalização toma forma no conceito de função quantidade de movimento. Um facto fundamental sobre as funções quantidade de movimento \mathbf{J} , prende-se com o facto de, se a Hamiltoniana H for invariante sob a acção de um grupo G , então \mathbf{J} é uma constante do movimento do campo vectorial hamiltoniano.

Esta secção faz um breve sumário de alguns conceitos necessários à definição da função quantidade de movimento e ao teorema de Noether, nomeadamente: grupos e álgebras de Lie, acção de um grupo e geradores infinitesimais.

A.4.1 Variedades de Poisson, grupos e álgebras de Lie

Uma variedade P , juntamente com a operação colchete $\{.,.\}$ em $\mathcal{F}(P)$, o espaço das funções suaves em P , que satisfaz as propriedades

1. $\{F, G\}$ é real e bilinear em F e G ,
2. Anti-simetria

$$\{F, G\} = -\{G, F\},$$

3. Identidade de Jacobi

$$\{\{F, G\}, H\} + \{\{H, F\}, G\} + \{\{G, H\}, F\} = 0,$$

4. Identidade de Leibniz

$$\{FG, H\} = F\{G, H\} + \{F, H\}G,$$

designa-se por variedade de Poisson.

Um grupo de Lie é um grupo que é, também, uma variedade diferenciável, nas quais as operações de grupo são de classe C^∞ [35]. Dito de outro forma, um grupo de Lie é uma variedade G que tem estrutura de grupo consistente com a estrutura de variedade, no sentido de que

$$\mu : G \times G \rightarrow G, \quad (g, h) \mapsto gh$$

é uma função C^∞ [26].

A recta real, com a operação adição, é o exemplo mais simples de grupo de Lie. \mathbb{R}^n , com a adição usual de vectores é um grupo de Lie abeliano. Os grupos das transformações lineares num espaço vectorial designam-se por grupos de Lie lineares. Por exemplo, o conjunto de todas as matrizes $n \times n$ não singulares forma o grupo $GL(n, \mathbb{R})$. O subconjunto de todas as matrizes $n \times n$ com determinante unitário forma o grupo $SL(n, \mathbb{R})$. O grupo ortogonal $O(n)$ é o grupo das matrizes $n \times n$ que satisfazem $AA^t = I$; este grupo preserva a forma bilinear simétrica $(x, y) = \sum_{i=1}^n x^i y^i = x^t y$. O grupo das rotações no espaço euclideano tridimensional, $SO(3)$ preserva o produto interno. O grupo $Sp(2n)$, designado por grupo simpléctico, preserva a forma bilinear anti-simétrica

$$\begin{aligned} (x, y) &= (x_1 y_{n+1} - x_{n+1} y_1) + (x_2 y_{n+2} - x_{n+2} y_2) + \cdots + (x_n y_{2n} - x_{2n} y_n) \\ &= x^t J y, \end{aligned}$$

onde a matriz J corresponde à matriz (2.7). As matrizes que deixam esta forma bilinear anti-simétrica invariante satisfazem a igualdade

$$A^t J A = J.$$

Como um grupo de Lie é uma variedade diferencial, faz sentido considerar, em cada ponto, o espaço tangente a essa variedade e, em particular, o espaço tangente na identidade do grupo. O espaço tangente nesse ponto, a identidade, chama-se álgebra de Lie. Uma álgebra de Lie \mathfrak{g} é um espaço vectorial linear sobre o corpo F , na qual o produto $[\ , \]$, chamado de colchete de Lie, obedece às seguintes propriedades:

1. $X, Y \in \mathfrak{g} \Rightarrow [X, Y] \in \mathfrak{g}$;
2. $[X, \alpha Y + \beta Z] = \alpha [X, Y] + \beta [X, Z]$, para $\alpha, \beta \in F$ e $X, Y, Z \in \mathfrak{g}$;

3. $[X, Y] = -[Y, X]$;
4. $[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0$.

Um exemplo simples de uma álgebra de Lie é dado por \mathbb{R}^3 , com o produto vectorial como o colchete de Lie, $[X, Y] = X \times Y$.

A álgebra de Lie de $GL(n, \mathbb{R})$ é o espaço vectorial de todas as transformações lineares de \mathbb{R}^n , com

$$[A, B] = AB - BA.$$

No caso de grupos lineares, as álgebras de Lie podem ser determinadas explicitamente, por diferenciar curvas na origem. Por exemplo, considerem-se as matrizes ortogonais seguintes, que correspondem a rotações em \mathbb{R}^3 , no sentido contrário ao dos ponteiros do relógio:

$$R_1(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix},$$

$$R_2(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix},$$

$$R_3(\gamma) = \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Estas rotações são curvas que passam na identidade em $SO(3)$. As suas derivadas na origem, $L_j = \dot{R}_j(0)$, são dadas por

$$L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A-13})$$

Estas matrizes formam uma base para a álgebra de Lie $so(3)$.

A.4.2 As funções adjuntas, acção de um grupo e geradores infinitesimais

Seja G um grupo de Lie e \mathfrak{g} a sua álgebra de Lie (identificada com $T_e G$, o espaço tangente ao elemento identidade em G). Considere-se a função $\psi : G \rightarrow \text{Aut } G$, definida por

$$\psi_g(h) = ghg^{-1}.$$

Para cada g em G , ψ_g é um automorfismo de G ; conseqüentemente, a derivada de ψ_g na identidade é um automorfismo da álgebra de Lie. Tal função representa-se por

$$\text{Ad}_g : \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}.$$

Como a função Ad_g é um automorfismo da álgebra de Lie, tal significa que Ad_g é uma transformação linear de \mathfrak{g} que preserva os colchetes de Lie. A função

$$\text{Ad} : G \rightarrow \text{Aut}(\mathfrak{g})$$

aplica g em Ad_g e designa-se por representação adjunta de G em \mathfrak{g} .

Como passar da representação de um grupo de Lie G , para a representação da sua álgebra de Lie \mathfrak{g} ? Derivando, na identidade, a função adjunta do grupo de Lie, $\text{Ad} : G \rightarrow \text{Aut}(\mathfrak{g})$, obtém-se a representação adjunta da álgebra de Lie \mathfrak{g}

$$\text{ad} : \mathfrak{g} \rightarrow \text{Der}(\mathfrak{g}).$$

$\text{Der}(\mathfrak{g})$ é a álgebra de Lie de $\text{Aut}(\mathfrak{g})$, a qual pode ser identificada com a álgebra derivada de \mathfrak{g} . A representação adjunta da álgebra de Lie relaciona-se com a estrutura dessa álgebra da seguinte forma:

$$\text{ad}_x(y) = [x, y],$$

para todo o $x, y \in \mathfrak{g}$.

Seja G um grupo e X um conjunto. A acção esquerda do grupo G em X é a função

$$G \times X \rightarrow X$$

definida por

$$(g, x) \rightarrow g \cdot x$$

que satisfaz

1. $(gh) \cdot x = g \cdot (hx)$, para todo o $g, h \in G$ e $x \in X$.
2. $e \cdot x = x$, para todo o $x \in X$, sendo e o elemento identidade de G .

A acção direita do grupo G em X é a função

$$X \times G \rightarrow X$$

que satisfaz

1. $x \cdot (gh) = (xg) \cdot h$, para todo o $g, h \in G$ e $x \in X$.
2. $x \cdot e = x$, para todo o $x \in X$, sendo e o elemento identidade de G .

Por exemplo, $SO(3)$ actua em \mathbb{R}^3 por $(A, x) \mapsto Ax$. Esta acção deixa a esfera S^2 invariante.

Seja x um elemento de uma álgebra de Lie \mathfrak{g} . A acção adjunta de x em \mathfrak{g} é o endomorfismo

$$\text{ad}_x : \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$$

onde

$$\text{ad}_x(y) = [x, y].$$

A acção adjunta de um grupo de Lie é a representação natural de G na sua álgebra de Lie. Esta representação é a versão linearizada da acção de G , em si próprio, por conjugação.

Seja P uma variedade de Poisson, G um grupo de Lie e $\Phi : G \times P \rightarrow P$ uma função suave que representa a acção esquerda de G em P por transformações canónicas. A acção $\Phi_g : P \rightarrow P$, tal que $\Phi_g(z) = g.z$, diz-se canónica se

$$(\Phi_g)^*\{F_1, F_2\} = \{(\Phi_g)^*F_1, (\Phi_g)^*F_2, \} \quad (\text{A-14})$$

para qualquer $F_1, F_2 \in \mathcal{F}(P)$ e qualquer $g \in G$. Se a variedade de Poisson P for simpléctica, com forma simpléctica ω^2 , então a acção é canónica se e só se for simpléctica, isto é, $(\Phi_g)^*\omega^2 = \omega^2$, para todo $g \in G$.

Um campo vectorial X em P diz-se invariante à esquerda se, para todo $p \in P$,

$$L_p^*X = X,$$

onde $L_p : P \rightarrow P$, $h \mapsto ph$ representa a função translação esquerda, numa variedade P .

Sejam M e N variedades e G um grupo de Lie que actua em M por $\Phi_g : M \rightarrow M$, e em N por $\Psi_g : N \rightarrow N$. Uma função suave $f : M \rightarrow N$ diz-se equivariante com respeito a estas acções se, para todo o $g \in G$,

$$f \circ \Phi_g = \Psi_g \circ f.$$

A função exponencial $\exp : \mathfrak{g} \rightarrow G$, dada por

$$\exp(X) = \gamma(1),$$

onde $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow G$, é o único subgrupo uniparamétrico de G (isto é, $\gamma(s+t) = \gamma(s)\gamma(t)$, para qualquer $s, t \in \mathbb{R}$) cujo vector tangente, na identidade, é igual a X . A função exponencial aplica a álgebra de Lie \mathfrak{g} no grupo de Lie G e fornece um difeomorfismo entre uma vizinhança de 0 em \mathfrak{g} e uma vizinhança de e em G . A função γ pode ser construída como a curva integral do campo vectorial invariante (esquerdo) associado a X .

Se G for um grupo de Lie de matrizes, então

$$\exp X = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{X^k}{k!} = I + X + \frac{X^2}{2} + \frac{X^3}{6} + \dots$$

A função exponencial goza das seguintes propriedades:

- (i) Para todo $X \in \mathfrak{g}$, a função $\gamma(t) = \exp(tX)$ é o único subgrupo uniparamétrico de G , cujo vector tangente na identidade é X . Então,

$$\exp(t+s)X = (\exp tX)(\exp sX)$$

e

$$\exp(-X) = (\exp X)^{-1}.$$

- (ii) A função $\exp : \mathfrak{g} \rightarrow G$ é suave. A sua derivada na identidade, $\exp_x : \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$ é a função identidade.
- (iii) O fluxo do campo vectorial X_ξ é dado por $(t, g) \mapsto g \exp(t\xi)$.
- (iv) $\text{Ad}(\exp(A)) = \exp(\text{ad}(A))$.

Seja $\Phi : G \times M \rightarrow M$ a acção. Para $\xi \in \mathfrak{g}$, a função $\Phi^\xi : \mathbb{R} \times M \rightarrow M$, definida por

$$\Phi^\xi(t, x) = \Phi(\exp t\xi, x)$$

é uma \mathbb{R} -acção em M . Por outras palavras, $\Phi_{\exp t\xi} : M \rightarrow M$ é um fluxo em M . O campo vectorial correspondente em M , dado por

$$\xi_M(x) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \Phi_{\exp t\xi}(x)$$

designa-se por gerador infinitesimal da acção correspondente a ξ . Então, um gerador infinitesimal da acção correspondente a um elemento de uma álgebra de Lie, $\xi \in \mathfrak{g}$, é um campo vectorial ξ_M em M , obtido por diferenciar a acção com respeito a g na identidade, na direcção ξ .

Por exemplo, as matrizes (A-13), que formam uma base da álgebra de Lie $so(3)$, geram o subgrupo uniparamétrico $R_j(\alpha)$ através da fórmula exponencial $R_j(\alpha) = e^{\alpha L_j}$. Estas matrizes L_j chamam-se os geradores infinitesimais do grupo de Lie $SO(3)$.

O caso interessante é ξ_M ter natureza globalmente hamiltoniana. Assim, assume-se que existe uma Hamiltoniana global $J(\xi) \in \mathcal{F}(M)$ para ξ_M , isto é

$$X_{J(\xi)} = \xi_M,$$

equação que permite determinar $J(\xi)$ a menos de uma constante.

A.4.3 Funções quantidade de movimento

Seja \mathfrak{g} uma álgebra de Lie que actua canonicamente (à esquerda) na variedade de Poisson P . Admita-se que existe uma função linear $J : \mathfrak{g} \rightarrow \mathcal{F}(P)$ tal que

$$X_{J(\xi)} = \xi_P, \tag{A-15}$$

para todo o $\xi \in \mathfrak{g}$. A função $\mathbf{J} : P \rightarrow \mathfrak{g}^*$, definida por

$$\langle \mathbf{J}(z), \xi \rangle = J(\xi)(z), \tag{A-16}$$

para todo o $\xi \in \mathfrak{g}$ e $z \in P$ designa-se por função quantidade de movimento da acção.

A função quantidade de movimento $\mathbf{J} : P \rightarrow \mathfrak{g}^*$ é uma função com a propriedade de,

para todo $\xi \in \mathfrak{g}$, $\langle \mathbf{J}(z), \xi \rangle = J(\xi)(z)$ gerar o campo vectorial ξ_P , ou seja, $X_{J(\xi)} = \xi_P$. Da definição de \mathbf{J} decorre a existência de um isomorfismo entre o conjunto de funções $P \rightarrow \mathfrak{g}^*$ e o conjunto de funções $\mathfrak{g} \rightarrow \mathcal{F}(P)$.

Considere-se uma partícula no espaço euclidiano tridimensional e seja $z = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$. A função momento angular é dada por $\mathbf{J}(z) = \mathbf{q} \times \mathbf{p}$. Seja $\xi \in \mathbb{R}^3$ e considere-se a componente de \mathbf{J} à volta do eixo ξ , nomeadamente,

$$\langle \mathbf{J}(z), \xi \rangle = \xi \cdot (\mathbf{q} \times \mathbf{p}).$$

Verifica-se que as equações de Hamilton determinadas por esta função de \mathbf{q} e \mathbf{p} descrevem rotações infinitesimais à volta do eixo ξ . A condição (A-16) é uma generalização deste momento angular.

Na mecânica, as funções quantidade de movimento têm um papel de relevo, porque elas são quantidades conservadas, conforme sintetizado no teorema de Noether.

Teorema A.7 (Teorema de Noether na versão hamiltoniana). *Se a álgebra de Lie actua canonicamente na variedade de Poisson P e admite uma função quantidade de movimento $\mathbf{J} \rightarrow \mathfrak{g}^*$, e se $H \in \mathcal{F}(P)$ é \mathfrak{g} -invariante ($\xi_P[H] = 0$, para todo $\xi \in \mathfrak{g}$), então \mathbf{J} é uma constante do movimento de H , ou seja*

$$\mathbf{J} \circ \psi_t = \mathbf{J},$$

onde ψ_t representa o fluxo do campo vectorial hamiltoniano.

Se a acção da álgebra de Lie é proveniente de uma acção canónica esquerda de um grupo de Lie, Φ , então a hipótese da invariância em H decorre da condição de invariância $H \circ \Phi_g = H$, para todo o $\xi \in \mathfrak{g}$.

A condição $\xi_P[H] = 0$ implica que $\{J(\xi), H\} = 0$ e, conseqüentemente, para cada elemento ξ da álgebra de Lie, $J(\xi)$ é uma quantidade conservada ao longo do fluxo de X_H . Tal significa que os valores da função quantidade de movimento \mathbf{J} , avaliados em \mathfrak{g}^* , o espaço dual de \mathfrak{g} , são conservados. Por outro lado, diferenciando $H \circ \Phi_g = H$, em ordem a g , na identidade e , na direcção ξ , obtém-se $\xi_P[H] = 0$.

O exemplo que se segue ilustra este processo, obtendo-se o clássico momento linear total [26]. Para um sistema de N partículas em \mathbb{R}^3 , escolha-se o espaço das configurações $Q = \mathbb{R}^{3N}$ e representem-se os elementos do espaço de fase $P = T^*\mathbb{R}^{3N} \cong \mathbb{R}^{6N} \cong \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N}$ por $(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}_j)$. Seja o grupo aditivo $G = \mathbb{R}^3$ de translações que actua em Q de acordo com

$$\Phi_x(\mathbf{q}^j) = \mathbf{q}^j + \mathbf{x},$$

onde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$. Cada um dos N vectores posição \mathbf{q}^j sofre uma translação dada pelo vector \mathbf{x} . O *lift* da acção Φ de G para o espaço de fases $T^*\mathbb{R}^{3N} \cong \mathbb{R}^{6N}$ é dado por

$$\mathbf{x} \cdot (\mathbf{q}^j, \mathbf{p}_j) = (\mathbf{q}^j + \mathbf{x}, \mathbf{p}_j), \quad j = 1, \dots, N. \quad (\text{A-17})$$

Seja $\xi \in \mathfrak{g} = \mathbb{R}^3$. O gerador infinitesimal ξ_P , no ponto $(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}_j) \in \mathbb{R}^{6N} = P$, é dado por diferenciar (A-17) em ordem a \mathbf{x} , na direcção ξ :

$$\xi_P(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}_j) = (\xi, \xi, \dots, \xi, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}).$$

Por outro lado, por definição de estrutura canónica simpléctica ω^2 em P , qualquer candidato $J(\xi)$ tem o campo vectorial hamiltoniano dado por

$$X_{J(\xi)}(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}_j) = \left(\frac{\partial J(\xi)}{\partial \mathbf{p}_j}, -\frac{\partial J(\xi)}{\partial \mathbf{q}^j} \right).$$

Então, da igualdade $X_{J(\xi)} = \xi_P$ resulta

$$\frac{\partial J(\xi)}{\partial \mathbf{p}_j} = \xi \quad \text{e} \quad \frac{\partial J(\xi)}{\partial \mathbf{q}^j} = 0, \quad 1 \leq j \leq N.$$

Resolvendo estas equações e escolhendo constantes tais que J seja linear, obtém-se

$$J(\xi)(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}_j) = \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j \right) \cdot \xi,$$

ou seja

$$J(\mathbf{q}^j, \mathbf{p}_j) = \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j,$$

expressão designada por momento linear total.

Seja $G \subset GL(n, \mathbb{R})$. Admita-se que G actua em \mathbb{R}^n pela multiplicação de matrizes à esquerda, ou seja, $\Phi_A(\mathbf{q}) = \mathbf{A}\mathbf{q}$. A acção induzida em $P = T^*\mathbb{R}^n$ é dada pela expressão

$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{q}, \mathbf{p}) = (\mathbf{A}\mathbf{q}, (\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{p})$$

e o gerador infinitesimal correspondente a $\xi \in \mathfrak{g}$ por

$$\xi_P(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = (\xi\mathbf{q}, -\xi^T\mathbf{p}).$$

Resolvendo as equações

$$\frac{\partial J(\xi)}{\partial \mathbf{p}} = \xi\mathbf{q} \quad \text{e} \quad \frac{\partial J(\xi)}{\partial \mathbf{q}} = \xi^T\mathbf{p},$$

vem

$$\langle \mathbf{J}(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \xi \rangle = (\xi\mathbf{q}) \cdot \mathbf{p}. \quad (\text{A-18})$$

Se $n = 3$ e $G = SO(3)$, a expressão (A-18) é igual a

$$\mathbf{J}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \mathbf{q} \times \mathbf{p},$$

o clássico momento angular. O teorema seguinte revela uma expressão que permite calcular a função quantidade de movimento de uma forma mais expedita, considerando, não a acção no espaço das configurações, mas o seu *lift* para o fibrado cotangente [26, 31].

Teorema A.8. *Admita-se que uma álgebra de Lie \mathfrak{g} actua (à esquerda) numa variedade Q . Esta acção em $P = T^*Q$ é hamiltoniana com função quantidade de movimento $\mathbf{J} : P \rightarrow \mathfrak{g}^*$ dada por*

$$\langle \mathbf{J}(\alpha_q), \xi \rangle = \langle \alpha_q, \xi_Q(q) \rangle. \quad (\text{A-19})$$

Reescreva-se o primeiro exemplo citado para o cálculo da função quantidade de movimento, determinando agora a função quantidade de movimento pelo teorema A.8. Considere-se o sistema de N -partículas no espaço de configurações $Q = \mathbb{R}^{3N}$. Admita-se que \mathbb{R}^3 actua em Q por translações, isto é, $\Phi : \mathbb{R}^3 \times Q \rightarrow Q$ é dado por

$$(x, (\mathbf{q}^1, \dots, \mathbf{q}^N)) \mapsto (\mathbf{q}^1 + x, \dots, \mathbf{q}^N + x).$$

O gerador infinitesimal correspondente a $\xi \in \mathbb{R}^3$ é:

$$\begin{aligned}\xi_Q(\mathbf{q}^1, \dots, \mathbf{q}^N) &= \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \Phi(t\xi, (\mathbf{q}^1, \dots, \mathbf{q}^N)) \\ &= \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} (\mathbf{q}^1 + t\xi, \dots, \mathbf{q}^N + t\xi) \\ &= (\xi, \dots, \xi) \in T_{\mathbf{q}^1, \dots, \mathbf{q}^N} \mathbb{R}^{3N}.\end{aligned}$$

Então, pelo teorema A.8, o *lift* da acção de $Q = \mathbb{R}^{3N}$ para $T^*\mathbb{R}^{3N}$ admite uma função quantidade de movimento dada por

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{J}(\mathbf{q}^1, \dots, \mathbf{q}^N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N), \xi \rangle &= \langle (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N), \xi_Q(\mathbf{q}^1, \dots, \mathbf{q}^N) \rangle \\ &= \mathbf{p}_1 \cdot \xi + \dots + \mathbf{p}_N \cdot \xi \\ &= (\mathbf{p}_1 + \dots + \mathbf{p}_N) \cdot \xi,\end{aligned}$$

ou seja, $\mathbf{J}(\mathbf{q}^1, \dots, \mathbf{q}^N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) = \mathbf{p}_1 + \dots + \mathbf{p}_N$, expressão que representa o momento linear clássico.

O teorema de Noether tem uma versão lagrangiana [27].

Teorema A.9 (Teorema de Noether na versão lagrangiana). *Considere-se um sistema lagrangiano $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$ invariante sob o lift da acção $\Phi : Q \times Q \rightarrow Q$. Então, a função quantidade de movimento lagrangiana $J_L : TQ \rightarrow \mathfrak{g}^*$ é uma quantidade conservada pelo fluxo, isto é, $J_L \circ \psi_L^t = J_L$, para todo o instante t .*

As funções quantidade de movimento lagrangiana e hamiltoniana relacionam-se através da expressão

$$J_L = (T_L)^* J_H.$$

A.5 Sistemas forçados

Seja a função $f_L : TQ \rightarrow T^*Q$ a força lagrangiana, dada em coordenadas por

$$f_L : (\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \mapsto (\mathbf{q}, f_L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})).$$

Dada esta força, e utilizando o princípio de Lagrange-d'Alembert, obtêm-se as equações de Euler-Lagrange forçadas, equivalentes a (2.27), escritas em coordenadas como

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \right) - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = f_L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \quad (\text{A-20})$$

As equações de Hamilton forçadas, em coordenadas, assumem a forma

$$\begin{aligned} X_p(\mathbf{q}, \mathbf{p}) &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + f_H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \\ X_q(\mathbf{q}, \mathbf{p}) &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \end{aligned} \tag{A-21}$$

onde X_H representa o campo vectorial hamiltoniano forçado e a função $f_H : T^*Q \rightarrow T^*Q$ é designada por força hamiltoniana.

A relação entre as forças lagrangiana e hamiltoniana é dada por

$$f_L = f_H \circ T_L.$$

As equações de Euler-Lagrange forçadas são equivalentes à equações de Hamilton forçadas.

[30] exemplifica com um sistema mecânico com dissipação de Rayleigh. Se a Hamiltoniana é da forma $\frac{1}{2}\mathbf{p}^T M(\mathbf{q})^{-1}\mathbf{p} + V(\mathbf{q})$, as equações do movimento são

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} - R(\mathbf{q})M(\mathbf{q})^{-1}\mathbf{p}, \end{aligned} \tag{A-22}$$

onde $R(\mathbf{q})$ é definida positiva. O caso mais simples é $R(\mathbf{q}) = cI, M(\mathbf{q}) = I$.

O teorema de Noether tem uma versão para sistemas forçados, mostrando-se que a força altera a função quantidade de movimento; no caso especial da força ser ortogonal à acção do grupo, então o teorema de Noether verifica-se [27].

Teorema A.10 (Teorema de Noether forçado na versão lagrangiana). *Considere-se o sistema lagrangiano $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$, com força $f_L : TQ \rightarrow T^*Q$ e uma acção simétrica $\Phi : G \times Q \rightarrow Q$, tal que $\langle f_L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}), \xi_Q(\mathbf{q}) \rangle = 0$ para todo $(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \in TQ$ e todo o $\xi \in \mathfrak{g}$. Então, a função quantidade de movimento lagrangiana $J_L : TQ \rightarrow \mathfrak{g}^*$ é preservada pelo fluxo, ou seja, $J_L \circ \psi_L^t = J_L$ para todo o t .*

Note-se que se $f_L \neq 0$, o fluxo lagrangiano e o fluxo hamiltoniano não preservam a 2-forma.

A.6 Sistemas com restrições

Seja Q uma variedade e considere-se uma Lagrangiana $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$, a restrição holónoma $\phi : Q \rightarrow \mathbb{R}^d$ e a correspondente subvariedade $N = \phi^{-1}(0) \subset Q$, onde 0 é um valor regular de ϕ . Como TN é uma subvariedade de TQ , pode restringir-se L a $L^N = L|_{TN}$. [27] prova o teorema seguinte.

Teorema A.11. *Dado a Lagrangiana $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$, com a restrição holónoma $\phi : Q \rightarrow \mathbb{R}^d$, faça-se $N = \phi^{-1}(0) \subset Q$ e $L^N = L|_{TN}$. As afirmações seguintes são equivalentes.*

1. $\mathbf{q} \in C(N)$ extremiza A^N e, por isso, resolve as equações de Euler-Lagrange para L^N .
2. $\mathbf{q} \in C(Q)$ e $\boldsymbol{\lambda} \in C(\mathbb{R}^d)$ satisfazem as equações de Euler-Lagrange com restrições

$$\frac{\partial L}{\partial q^i}(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) \right) = \left\langle \boldsymbol{\lambda}(t), \frac{\partial \phi}{\partial q^i}(\mathbf{q}(t)) \right\rangle, \quad (\text{A-23})$$

$$\phi(\mathbf{q}(t)) = 0.$$

3. $(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}) \in C(Q \times \mathbb{R}^d)$ extremiza $\bar{A}(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}) = A(\mathbf{q}) - \langle \boldsymbol{\lambda}, \Phi(\mathbf{q}) \rangle$, e então, resolve as equações de Euler-Lagrange para a Lagrangiana aumentada $\bar{L} : T(Q \times \mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}$ definido por

$$\bar{L}(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}, \dot{\mathbf{q}}, \dot{\boldsymbol{\lambda}}) = L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) - \langle \boldsymbol{\lambda}, \phi(\mathbf{q}) \rangle,$$

onde $\Phi : C(Q) \rightarrow C(\mathbb{R}^d)$ é definida por $\Phi(\mathbf{q})(t) = \phi(\mathbf{q}(t))$.

Considere-se a Hamiltoniana $H : T^*Q \rightarrow \mathbb{R}$ e defina-se a Hamiltoniana aumentada

$$\bar{H}(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{p}, \pi) = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + \langle \boldsymbol{\lambda}, \phi(\mathbf{q}) \rangle,$$

onde π é a variável conjugada a $\boldsymbol{\lambda}$. As equações de Hamilton com restrições são

$$\bar{X}_{q^i}(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{p}, \pi) = \frac{\partial H}{\partial p_i},$$

$$\bar{X}_{p_i} = -\frac{\partial H}{\partial q^i} - \left\langle \boldsymbol{\lambda}, \frac{\partial \phi}{\partial q^i}(\mathbf{q}) \right\rangle, \quad (\text{A-24})$$

$$\phi(\mathbf{q}) = 0.$$

As equações de Hamilton com restrições (A-24) são equivalentes às equações de Euler-Lagrange com restrições (A-23).

Os sistemas com restrições em TN e T^*N definidos por L^N e H^N , respectivamente, são sistemas lagrangianos e hamiltonianos *standard* e, por isso, gozam das propriedades de conservação usuais.

Por exemplo, o fluxo do sistema lagrangiano com restrições preserva a 2-forma simpléctica lagrangiana

$$\omega_{L^N}^2 = (Ti)^* \omega_L^2,$$

onde a função $Ti : TN \rightarrow TQ$ permite fazer a imersão de TN em TQ , e o fluxo do sistema hamiltoniano com restrições preserva a 2-forma simpléctica hamiltoniana

$$\omega_{H^N}^2 = \eta^* \omega^2,$$

onde $\eta : T^*N \rightarrow T^*Q$ permite fazer a imersão de T^*N em T^*Q .

O teorema de Noether é válido para os sistemas com e sem restrições, e é essencialmente a mesma função quantidade de movimento que é preservada, ou seja

$$J_{L^N} = J_L \circ Ti$$

e

$$J_{H^N} = J_H \circ \eta.$$

A.7 Sistemas forçados com restrições

Os sistemas lagrangianos e hamiltonianos forçados e com constrangimentos têm uma formulação que se traduz na combinação da formulação de sistemas forçados com a formulação de sistemas com restrições. Assuma-se que Q é uma variedade, $\phi : Q \rightarrow \mathbb{R}^d$ é uma restrição holónoma e $N = \phi^{-1}(0) \subset Q$.

Dada a força lagrangiana $f_L : TQ \rightarrow T^*Q$, a força lagrangiana em TN é dada por $f_L^N = T^*i \circ f_L \circ Ti : TN \rightarrow T^*N$. Apelando ao teorema de Lagrange-d'Alembert, no espaço do sistema com restrições, obtém-se o teorema seguinte.

Teorema A.12. Dado a Lagrangiana $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$ com força lagrangiana $f_L : TQ \rightarrow T^*Q$ e restrição holónoma $\phi : Q \rightarrow \mathbb{R}^d$, faça-se $N = \phi^{-1}(0) \subset Q$, $f_L^N = T^*i \circ f_L \circ Ti$ e $L^N = L|_{TN}$. As afirmações seguintes são equivalentes:

1. $\mathbf{q} \in C(N)$ satisfaz o princípio de Lagrange-d'Alembert para L^N e f_L^N e, por isso, resolve as equações de Euler-Lagrange forçadas.
2. $\mathbf{q} \in C(Q)$ e $\boldsymbol{\lambda} \in C(\mathbb{R}^d)$ satisfazem as equações de Euler-Lagrange forçadas com restrições:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial q^i}(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) \right) + f_L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) &= \left\langle \boldsymbol{\lambda}(t), \frac{\partial \phi}{\partial q^i}(\mathbf{q}(t)) \right\rangle, \\ \phi(\mathbf{q}(t)) &= 0. \end{aligned} \tag{A-25}$$

3. $(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}) \in C(Q \times \mathbb{R}^d)$ satisfaz o princípio de Lagrange-d'Alembert, e então, resolve as equações de Euler-Lagrange forçadas, para $\bar{L} : T^*(Q \times \mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}$ e $\bar{f}_L : T(Q \times \mathbb{R}^d) \rightarrow T^*(Q \times \mathbb{R}^d)$ definidas por

$$\begin{aligned} \bar{L}(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}, \dot{\mathbf{q}}, \dot{\boldsymbol{\lambda}}) &= L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) - \langle \boldsymbol{\lambda}, \phi(\mathbf{q}) \rangle, \\ \bar{f}_L(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}, \dot{\mathbf{q}}, \dot{\boldsymbol{\lambda}}) &= \pi_Q^* \circ f_L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}), \end{aligned}$$

onde $\pi_Q : Q \times \mathbb{R}^d \rightarrow Q$ representa a projecção.

Note-se que, nas equações de Euler-Lagrange forçadas com restrições (A-25), a força e os multiplicadores de Lagrange entram da mesma forma; por este motivo, por vezes, o multiplicador de Lagrange é designado por força da restrição.

As equações de Hamilton forçadas com restrições assumem a forma

$$\begin{aligned} X_{q^i}(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{p}, \pi) &= \frac{\partial H}{\partial p_i}, \\ X_{p_i} &= -\frac{\partial H}{\partial q^i} + f_H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - \left\langle \boldsymbol{\lambda}, \frac{\partial \phi}{\partial q^i}(\mathbf{q}) \right\rangle, \\ \phi(\mathbf{q}) &= 0. \end{aligned} \tag{A-26}$$

O teorema de Noether tem uma versão para sistemas forçados com restrições. Por um lado, se a Lagrangiana é invariante sob a acção de um grupo e as forças forem ortogonais à acção, o teorema de Noether é válido e, por outro lado, se f_L for ortogonal a ξ_Q , então a força f_L^N também será ortogonal ao gerador infinitesimal restrito ξ_N .

Teorema A.13 (Teorema de Noether forçado com restrições). *Considere-se um sistema lagrangiano $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$ na variedade restrita $N \subset Q$, com força $f_L : TQ \rightarrow T^*Q$ e acção simétrica $\Phi : G \times Q \rightarrow Q$ tal que $\langle f_L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}), \xi_Q(\mathbf{q}) \rangle = 0$ para todo $(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \in TQ$ e $\xi \in \mathfrak{g}$. Então, a função quantidade de movimento lagrangiana restringida $J_{LN} : TN \rightarrow \mathfrak{g}^*$ será preservada pelo fluxo lagrangiano forçado num sistema com restrições.*

Bibliografia

- [1] V. I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer-Verlag, Second edition, 1989.
- [2] U. Ascher and S. Reich. The midpoint scheme and variants for hamiltonian systems: advantages and pitfalls. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(3):1045–1065, 1999.
- [3] E. Barth, B. Leimkuhler, and S. Reich. A test set for molecular dynamics algorithms. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 24:73–103, 2002.
- [4] S. Bond and B. Leimkuhler. Molecular dynamics and the accuracy of numerically computed averages. *Acta Numerica*, 16:1–65, 2007.
- [5] C. Budd, B. Leimkuhler, and M. Piggott. Scaling invariance and adaptivity. *Appl. Numer. Math.*, 39:261–288, 2001.
- [6] C. Budd and M. D. Piggott. Geometric integration and its applications. In *Handbook of numerical analysis*, volume XI, pages 35–139. North-Holland, 2003.
- [7] J. Cartwright and O. Piro. The dynamics of Runge-Kutta methods. *Int. J. Bifurcation and Chaos*, 2(3):427–449, 1992.
- [8] J. D. de Deus, M. Pimenta, A. Noronha, T. Pena, and P. Brogueira. *Introdução à Física*. McGraw-Hill, 2.^a edition, 2000.
- [9] Z. Ge and J. E. Marsden. Lie-Poisson Hamilton-Jacobi theory and Lie-Poisson integrators. *Phys. Lett. A*, 133:134–139, 1988.
- [10] J. M. Haile. *Molecular Dynamics Simulation*. Wiley Professional Paperback Series. John Wiley & Sons, Inc, 1997.

- [11] E. Hairer. Important aspects of geometric numerical integration. *Journal of Scientific Computing*, 25(1):67–81, October 2005.
- [12] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. Geometric numerical integration illustrated by the Störmer-Verlet method. *Acta Numerica*, pages 1–51, 2003.
- [13] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. *Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms For Ordinary Differential Equations*. Springer Series in Computational Mathematics. Springer, Second edition, 2006.
- [14] E. Hairer, S.P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I*. Springer Series in Computational Mathematics. Springer, Second edition, 2000.
- [15] Louis N. Hand and Janet D. Finch. *Analytical Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [16] A. Iserles. *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [17] C. Kane, J. E. Marsden, and M. Ortiz. Symplectic-energy-momentum preserving variational integrators. *Journal of Mathematical Physics*, 40(7):3353–3371, 1999.
- [18] C. Kane, J. E. Marsden, M. Ortiz, and M. West. Variational integrators and the Newmark algorithm for conservative and dissipative mechanical systems. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 49:1295–1325, 2000.
- [19] B. Leimkuhler and S. Reich. Symplectic integration of constrained hamiltonian systems. *Math. Comp.*, 63:589–605, 1994.
- [20] B. Leimkuhler and S. Reich. *Simulating Hamiltonian Dynamics*, volume 14 of *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics*. Cambridge University Press, 2004.
- [21] B. Leimkuhler and R. Skeel. Symplectic numerical integrators in constrained hamiltonian systems. *J. Comput. Phys*, 112:117–125, 1994.

- [22] B. J. Leimkuhler, S. Reich, and R. D. Skeel. Integration methods for molecular dynamics. In J. P. Mesirov, K. Schulten, and De Witt Sumners, editors, *Mathematical Approaches to Biomolecular Structure and Dynamics*, volume 82 of *IMA Volumes in Mathematics and its Applications*, pages 161–185. Springer-Verlag, 1996.
- [23] A. Lew, J. E. Marsden, M. Ortiz, and M. West. An overview of variational integrators. In L. P. Franca, T. E. Tezduyar, and A. Masud, editors, *Finite Element Methods: 1970's and beyond*, pages 98–115. CIMNE, Barcelona, 2003.
- [24] A. Lew, J. E. Marsden, M. Ortiz, and M. West. Variational time integrators. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 60:153–212, 2004.
- [25] R. S. MacKay. Some aspects of the dynamics and numerics of Hamiltonian systems. In D.S. Broomhead and A. Iserles, editors, *The Dynamics of Numerics and the Numerics of Dynamics*, volume 34 of *The IMA Conference Series*, pages 137–193. Clarendon Press, Oxford, 1992.
- [26] J. E. Marsden and T. S. Ratiu. *Introduction to Mechanics and Symmetry*. Texts in Applied Mathematics 17. Springer-Verlag, New York, Second edition, 1999.
- [27] J. E. Marsden and M. West. Discrete mechanics and variational integrators. *Acta Numerica*, 10:357–514, 2001.
- [28] R. McLachlan and R. Quispel. Six Lectures on the Geometric Integration of ODE's. In R. Devone, A. Iserles, and E. Süli, editors, *Foundations of Computational Mathematics*, pages 155–210. Cambridge University Press, 2001.
- [29] R. I. McLachlan and P. Atela. The accuracy of symplectic integrators. *Nonlinearity*, 5(2):541–562, 1992.
- [30] R. I. McLachlan and R. Quispel. Geometric Integrators for ODE's. *J. Phys. A*, 39(19):5251–5286, 2006.
- [31] T. S. Ratiu, R. Tudoran, L. Sbano, E. S. Dias, and G. Terra. A crash course in geometric mechanics. In J. Montaldi and T. Ratiu, editors, *Geometric Mechanics and Symmetry: the Peyresq Lectures*, London Mathematical Society Lecture Notes Series, pages 23–156. Cambridge University Press, 2005.

- [32] S. Reich. Symplectic integration of constrained hamiltonian systems by composition methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33:475–491, 1996.
- [33] S. Reich. Backward error analysis for numerical integrators. *SIAM J. Num. Anal.*, 36:1549–1570, 1999.
- [34] J.M. Sanz-Serna and M.P. Calvo. *Numerical Hamiltonian Problems*. Chapman & Hall, London, 1994.
- [35] D. H. Sattinger and O. L. Weaver. *Lie Groups and Algebras with Application to Physics, Geometry and Mechanics*, volume 61 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1986.
- [36] R. Skeel. Integration schemes for molecular dynamics and related applications. In M. Ainsworth, J. Levesley, and M. Marletta, editors, *The Graduate Students Guide to Numerical Analysis*, SSCM, pages 119–176. CIMNE, 1999.
- [37] R. Skeel, G. Zhang, and T. Schlick. A family of symplectic integrators: stability, accuracy, and molecular dynamics applications. *SIAM J. Sci. Comput.*, 18(1):203–222, 1997.
- [38] L. Verlet. Computer «experiments» on classic fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Phys. Rev.*, 159:98–103, 1967.
- [39] J. Wendlandt and J. E. Marsden. Mechanical integrators derived from a discrete variational principle. *Physica D*, 106:223–246, 1997.