

Capítulo 3

Transformações canônicas

Destacamos, neste Capítulo, o papel central desempenhado pelas chamadas transformações canônicas na resolução de problemas dinâmicos na formulação Hamiltoniana. A descrição geométrica do espaço de fase de sistemas Hamiltonianos é ampliada para o caso de muitos graus de liberdade.

3.1 Função geratriz

Consideramos, aqui, um sistema com n graus de liberdade descrito pelas variáveis canonicamente conjugadas (p_i, q_i) . Podemos fazer uma transformação destas variáveis antigas para novas variáveis (P_i, Q_i) . Essa transformação é dita *canônica* se as equações de Hamilton tiverem a mesma forma tanto para as variáveis antigas como para as novas.

Especificamente, se as equações de Hamilton nas variáveis antigas forem

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (3.1)$$

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (3.2)$$

sendo $H(p_i, q_i, t)$ a Hamiltoniana correspondente, então as equações de Hamilton nas variáveis novas serão

$$\frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}, \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (3.3)$$

$$\frac{dQ_i}{dt} = \frac{\partial K}{\partial P_i}, \quad (3.4)$$

onde $K(P_i, Q_i, t)$ é a nova Hamiltoniana, ou *Kamiltoniana*.

Para encontrarmos as equações que viabilizam uma transformação canônica, vamos recordar o princípio de Hamilton que, no formalismo Lagrangiano, determina as equações do movimento [cf. Eqs. (1.21) e (1.23)]

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt = 0. \quad (3.5)$$

Em vista da transformação de Legendre (2.10) podemos expressar o princípio de Hamilton como

$$\delta \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - H(p_i, q_i, t) \right] \right\} = 0. \quad (3.6)$$

Se as equações de Hamilton têm as mesmas formas nas novas variáveis, isso significa que o princípio de Hamilton também deve valer para elas, ou seja:

$$\delta \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_{i=1}^n P_i \dot{Q}_i - K(P_i, Q_i, t) \right] \right\} = 0. \quad (3.7)$$

Os integrandos das expressões (3.6) e (3.7) podem diferir, no máximo, pela derivada total de uma função arbitrária do tempo, que chamaremos “função geratriz”. Consideraremos que a função geratriz tenha variáveis mistas, ou seja, uma antiga e uma nova. Existem, assim, quatro tipos de função geratriz. A função de primeira espécie depende das coordenadas novas e velhas, e é denotada por $F_1(q_i, Q_i, t)$, de modo que a diferença entre os integrandos de (3.6) e (3.7) é dada por

$$\left[\sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - H(p_i, q_i, t) \right] - \left[\sum_{i=1}^n P_i \dot{Q}_i - K(P_i, Q_i, t) \right] = \frac{dF_1}{dt}. \quad (3.8)$$

Usando a fórmula da derivada total,

$$\frac{dF_1(q_i, Q_i, t)}{dt} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i \right) + \frac{\partial F_1}{\partial t}, \quad (3.9)$$

e comparando os termos semelhantes em ambos os membros de (3.8) decorrem as equações da transformação canônica de primeira espécie:

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (3.10)$$

$$P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}, \quad (3.11)$$

$$K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}. \quad (3.12)$$

A função geratriz mais importante, na prática, é a de segunda espécie, que depende das coordenadas antigas e dos novos momenta: $F_2(q_i, P_i, t)$. Ela é a transformada de Legendre da função geratriz de primeira espécie:

$$F_2(q_i, P_i, t) = \sum_{i=1}^n Q_i P_i + F_1(q_i, Q_i, t). \quad (3.13)$$

Derivando todos os termos em relação ao tempo é

$$\frac{dF_2}{dt} = \frac{dF_1}{dt} + \sum_{i=1}^n (\dot{Q}_i P_i + Q_i \dot{P}_i). \quad (3.14)$$

Usando (3.8) e a derivada total de F_2 teremos

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial F_2}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \dot{P}_i \right) + \frac{\partial F_2}{\partial t} = \sum_{i=1}^n \{ p_i \dot{q}_i - H - P_i \dot{Q}_i + K + \dot{Q}_i P_i + Q_i \dot{P}_i \}. \quad (3.15)$$

Comparando os dois membros desta equação, obtemos as equações da transformação canônica de segunda espécie:

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (3.16)$$

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}, \quad (3.17)$$

$$K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}. \quad (3.18)$$

Através de transformações de Lagrange apropriadas de F_1 e F_2 podemos, também, obter transformações canônicas de terceira e quarta espécies. A função geratriz de terceira espécie depende dos antigos e dos novos momenta:

$$F_3(p_i, Q_i, t) = F_1(q_i, Q_i, t) - \sum_i q_i p_i, \quad (3.19)$$

tal que as equações de transformação são

$$q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i}, \quad (3.20)$$

$$P_i = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i}, \quad (3.21)$$

$$K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t}. \quad (3.22)$$

Analogamente, a função geratriz de quarta espécie depende das novas coordenadas e momenta:

$$F_4(p_i, P_i, t) = F_1(q_i, Q_i, t) - \sum_i p_i q_i + \sum_i P_i Q_i, \quad (3.23)$$

com as respectivas equações de transformação:

$$q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i}, \quad (3.24)$$

$$Q_i = \frac{\partial F_4}{\partial P_i}, \quad (3.25)$$

$$K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t}. \quad (3.26)$$

3.2 Exemplos de transformações canônicas

3.2.1 Oscilador Harmônico

Consideramos a Hamiltoniana do oscilador harmônico (2.25)

$$H(p, q) = G \frac{p^2}{2} + F \frac{q^2}{2}, \quad (3.27)$$

e a transformação canônica $(p, q) \rightarrow (P, Q)$, efetuada por meio da função geratriz de primeira espécie

$$F_1(q, Q) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{F}{G}} q^2 \cotg Q. \quad (3.28)$$

Aplicando as equações da transformação de primeira espécie (3.10)-(3.11) resulta que

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = \sqrt{\frac{F}{G}} q \cotg Q, \quad (3.29)$$

$$P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{F}{G}} \frac{q^2}{\sen^2 Q}, \quad (3.30)$$

e resolvendo para as variáveis antigas em termos das novas, chega-se às equações

$$q = \left(\frac{G}{F}\right)^{1/4} \sqrt{2P} \sin Q, \quad (3.31)$$

$$p = \left(\frac{F}{G}\right)^{1/4} \sqrt{2P} \cos Q, \quad (3.32)$$

tal que a Kamiltoniana seja

$$K(P, Q) = H(p(P, Q), q(P, Q)) = P\sqrt{FG}(\cos^2 Q + \sin^2 Q) = P\sqrt{FG}. \quad (3.33)$$

As equações de Hamilton nas novas variáveis serão

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial Q} = 0, \quad (3.34)$$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{\partial K}{\partial P} = \sqrt{FG}. \quad (3.35)$$

cujas soluções são bastante simples

$$P(t) = P(t=0), \quad (3.36)$$

$$Q(t) = Q(t=0) + t\sqrt{FG}. \quad (3.37)$$

Para obter as soluções nas variáveis antigas nós usamos (3.31) e (3.32), fornecendo

$$p(t) = \left(\frac{F}{G}\right)^{1/4} \sqrt{2P_0} \cos(Q_0 + \omega t), \quad (3.38)$$

$$q(t) = \left(\frac{G}{F}\right)^{1/4} \sqrt{2P_0} \sin(Q_0 + \omega t), \quad (3.39)$$

onde $\omega = \sqrt{FG}$ é a frequência das oscilações. Escolhendo adequadamente (P_0, Q_0) chega-se à solução do problema em função das condições iniciais [vide (1.72)].

3.2.2 Partícula sob um potencial do tipo inverso quadrado

Um segundo exemplo é a Hamiltoniana de uma partícula de massa unitária, movendo-se em uma dimensão, e sujeita a um potencial $U(q) = 1/2q^2$:

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2q^2}. \quad (3.40)$$

Faremos uma transformação canônica $(p, q) \rightarrow (P, Q)$ através de uma função geratriz de segunda espécie

$$F_2(q, P) = P \ln q. \quad (3.41)$$

As equações da transformação de segunda espécie, dadas por (3.16)-(3.17), são

$$p = \frac{\partial F_2}{\partial q} = \frac{P}{q}, \quad (3.42)$$

$$Q = \frac{\partial F_2}{\partial P} = \ln q, \quad (3.43)$$

que, após invertidas, nos fornecem

$$q = e^Q, \quad (3.44)$$

$$p = P e^{-Q}, \quad (3.45)$$

tal que a Kamiltoniana, de (3.18), seja

$$K(P, Q) = \left(\frac{P^2 + 1}{2} \right) e^{-2Q} = E, \quad (3.46)$$

onde E é a energia (constante).

As novas equações de Hamilton tornam-se

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial Q} = (P^2 + 1) e^{-2Q} = 2E, \quad (3.47)$$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{\partial K}{\partial P} = P e^{-2Q}. \quad (3.48)$$

A solução de (3.47) é

$$P(t) = 2Et + P_0, \quad (3.49)$$

onde $P_0 = P(t = 0)$. Colocando em evidência Q em (3.47) obtemos, após uma integração elementar,

$$Q(t) = \ln \sqrt{2Et^2 + 2tP_0 + \frac{P_0^2 + 1}{2E}}. \quad (3.50)$$

3.2.3 Partícula num campo magnético uniforme

Vamos revisitar o problema, visto nos Capítulos precedentes, de uma partícula de massa m e carga q sujeita a um campo magnético uniforme $\mathbf{B} = B_0 \hat{\mathbf{k}}$. As coordenadas generalizadas são (x, y, z) e os momenta canonicamente conjugados, (p_x, p_y, p_z) , respectivamente. A Hamiltoniana correspondente, dada por (2.136), é

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \Omega y p_x + \frac{1}{2} m \Omega^2 y^2. \quad (3.51)$$

Efetuamos uma primeira transformação canônica $(x, y; p_x, p_y) \rightarrow (\phi, Y; P_\phi, P_Y)$, por meio de uma função geratriz de primeira espécie

$$F_1(x, y; \phi, Y) = m\Omega \left[\frac{1}{2} (y - Y)^2 \cotg \phi - xY \right]. \quad (3.52)$$

As equações da transformação canônica (3.10)-(3.11) são

$$p_x = \frac{\partial F_1}{\partial x} = -m\Omega y, \quad (3.53)$$

$$p_y = \frac{\partial F_1}{\partial y} = m\Omega (y - Y) \cotg \phi, \quad (3.54)$$

$$P_\phi = -\frac{\partial F_1}{\partial \phi} = \frac{1}{2} m\Omega (y - Y)^2 \operatorname{cosec}^2 \phi, \quad (3.55)$$

$$P_Y = -\frac{\partial F_1}{\partial Y} = m\Omega [(y - Y) \cotg \phi + x]. \quad (3.56)$$

Usando a equação (3.55) obtemos

$$y = Y + \sqrt{\frac{2P_\phi}{m\Omega}} \sin \phi, \quad (3.57)$$

de maneira que a Kamiltoniana será

$$\tilde{K}(p_z, P_\phi) = \frac{1}{2m} p_z^2 + \Omega P_\phi. \quad (3.58)$$

Uma segunda transformação canônica $(\phi, z; P_\phi, p_z) \rightarrow (\phi, Z; P_\phi, P_Z)$, através da função geratriz de segunda espécie

$$F_2(P_Z, z) = zP_Z, \quad (3.59)$$

gera a transformação identidade

$$Z = \frac{\partial F_2}{\partial P_Z} = z, \quad p_z = \frac{\partial F_2}{\partial z} = P_Z, \quad (3.60)$$

com a nova Kamiltoniana dada por

$$K(P_Z, P_\phi) = \frac{P_Z^2}{2m} + \Omega P_\phi. \quad (3.61)$$

As equações de Hamilton correspondentes a (3.61) são

$$\dot{\phi} = \frac{\partial K}{\partial P_\phi} = \Omega, \quad \dot{Y} = \frac{\partial K}{\partial P_Y} = 0, \quad \dot{Z} = \frac{\partial K}{\partial P_Z} = \frac{P_Z}{m}, \quad (3.62)$$

$$\dot{P}_\phi = -\frac{\partial K}{\partial \phi} = 0, \quad \dot{P}_Y = -\frac{\partial K}{\partial Y} = 0, \quad \dot{P}_Z = -\frac{\partial K}{\partial Z} = 0. \quad (3.63)$$

Como a Kamiltoniana (3.61) é cíclica em ϕ , Y e Z os momenta conjugados correspondentes, (P_ϕ, P_Y, P_Z) , respectivamente, são constantes do movimento. Em função destas constantes, podemos definir as seguintes quantidades

$$\rho = \sqrt{2P_\phi m \Omega}, \quad X = \frac{P_Y}{m\Omega}, \quad (3.64)$$

tal que, usando (3.55) e (3.56), obtemos

$$x = X + \rho \cos \phi, \quad y = Y - \rho \sin \phi. \quad (3.65)$$

Interpretamos, portanto, (X, Y, Z) como as coordenadas do centro de guia das partículas carregadas, que é o centro de uma circunferência de raio dado por (1.213) como (raio de Larmor ou girorraio)

$$\rho = \frac{mv_\perp}{eB_0} = \frac{v_\perp}{\Omega}. \quad (3.66)$$

onde usamos (1.198), e

$$v_\perp = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}, \quad (3.67)$$

é a componente da velocidade na direção perpendicular ao campo magnético. A variável ϕ é o ângulo formado pelo raio girante com o eixo x , ou “girofase” [Fig. 3.1].

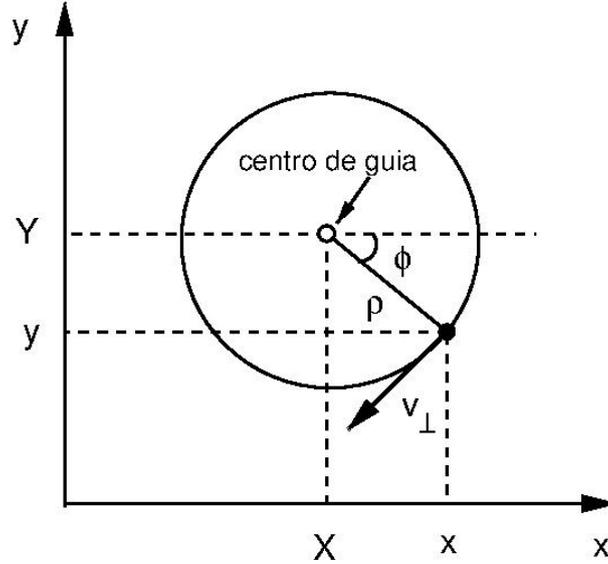


Figura 3.1: Movimento no plano perpendicular ao campo magnético.

Usando (3.64) obtemos para o momentum conjugado à girofase,

$$P_\phi = \frac{1}{2}m\Omega\rho^2 = \frac{1}{2}\frac{mv_\perp^2}{\Omega} = \frac{m\mu}{e}, \quad (3.68)$$

onde o momento de dipolo magnético associado ao movimento circular uniforme da partícula carregada é

$$\mu = \left(\frac{e}{\tau}\right)(\pi\rho^2) = \frac{1}{2}e\Omega\rho^2, \quad (3.69)$$

sendo $\tau = 2\pi/\Omega$ o período do movimento.

Derivando (3.65) em relação ao tempo, e usando (3.62), as componentes da velocidade da partícula são

$$v_x = -\rho\Omega \sin\phi = -v_\perp \sin\phi \quad (3.70)$$

$$v_y = -\rho\Omega \cos\phi = -v_\perp \cos\phi. \quad (3.71)$$

3.3 Colchetes de Poisson

Sejam duas funções das coordenadas e momenta generalizados, e ainda do tempo, denotadas por $u(p_i, q_i, t)$ e $v(p_i, q_i, t)$. Os colchetes de Poisson para elas são definidos como

$$\{u, v\} = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial v}{\partial q_k} \frac{\partial u}{\partial p_k} \right). \quad (3.72)$$

A partir desta definição podemos demonstrar as seguintes propriedades

$$\{u, v\} = -\{v, u\}, \quad (3.73)$$

$$\{u, u\} = 0, \quad (3.74)$$

$$\{\{u, v\}, w\} + \{\{w, u\}, v\} + \{\{v, w\}, u\} = 0, \quad (3.75)$$

$$\{uv, w\} = \{u, \{v, w\}\} + \{v, \{u, w\}\}, \quad (3.76)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \{u, v\} = \left\{ \frac{\partial u}{\partial t}, v \right\} + \left\{ u, \frac{\partial v}{\partial t} \right\}, \quad (3.77)$$

sendo que (3.75) é denominada identidade de Jacobi.

Fazendo $u = q_i$ e $v = p_j$ temos

$$\{q_i, p_j\} = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_j}{\partial q_k} \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \right) = \sum_{k=1}^n \delta_{ik} \delta_{kj}. \quad (3.78)$$

Usando a expressão para o produto de matrizes obtemos um dos colchetes de Poisson fundamentais, dado pela delta de Krönecher:

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j, \\ 0 & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (3.79)$$

De modo análogo pode-se mostrar os demais colchetes de Poisson fundamentais:

$$\{q_i, q_j\} = 0, \quad (3.80)$$

$$\{p_i, p_j\} = 0. \quad (3.81)$$

Quando $u = q_i$ e $v = H$ temos

$$\{q_i, H\} = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \right) = \sum_{k=1}^n \delta_{ik} \dot{q}_k = \dot{q}_i, \quad (3.82)$$

onde usamos as equações de Hamilton (3.1)-(3.2). Repetindo o procedimento para p_i podemos expressar as equações de Hamilton em termos dos colchetes de Poisson como

$$\frac{dq_i}{dt} = \{q_i, H\}, \quad (3.83)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = \{p_i, H\}. \quad (3.84)$$

A derivada total de uma função arbitrária das coordenadas, momenta e tempo, denotada por $u(p_i, q_i, t)$ é, usando (3.72) e as equações de Hamilton, dada por

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{dq_k}{dt} + \frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{dp_k}{dt} \right) + \frac{\partial u}{\partial t}, \\ &= \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) + \frac{\partial u}{\partial t}, \\ &= \{u, H\} + \frac{\partial u}{\partial t}. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Se u não depende explicitamente do tempo ($\partial u / \partial t = 0$) então

$$\frac{du}{dt} = \{u, H\}. \quad (3.86)$$

A quantidade $u(p_i, q_i)$ é uma constante do movimento se $du/dt = 0$. Neste caso a condição anterior implica em

$$\{u, H\} = 0. \quad (3.87)$$

Como $\{H, H\} = 0$, então se H não depende explicitamente do tempo, a Hamiltoniana é uma constante do movimento.

Se u e v forem constantes do movimento, então $\{u, v\}$ também será uma constante do movimento (teorema de Poisson). Para mostrar esta proposição, consideremos que u e v não dependam explicitamente do tempo. Fazendo $w = H$ na identidade de Jacobi (3.75) obtemos

$$\{\{u, v\}, H\} + \{\{H, u\}, v\} + \{\{v, H\}, u\} = 0. \quad (3.88)$$

Se u e v são constantes do movimento, de (3.87) temos que $\{u, H\} = \{v, H\} = 0$, donde (3.88) implica em $\{\{u, v\}, H\} = 0$, provando que $\{u, v\}$ é uma constante do movimento. Se f e g dependem explicitamente do tempo, a demonstração do teorema de Poisson pode ser encontrada em [35], parágrafo 42.

Os colchetes de Poisson são invariantes sob uma transformação canônica: $(p_i, q_i) \rightarrow (P_i, Q_i)$

$$\{u, v\}_{(p,q)} = \{u, v\}_{(P,Q)}. \quad (3.89)$$

Uma demonstração desse teorema baseia-se no fato de que, se as equações de Hamilton são válidas em ambos os conjuntos de variáveis, (p_i, q_i) e (P_i, Q_i) , então os colchetes de Poisson fundamentais também são os mesmos:

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij}, \quad (3.90)$$

$$\{Q_i, Q_j\} = 0, \quad (3.91)$$

$$\{P_i, P_j\} = 0. \quad (3.92)$$

Supondo que as quantidades $u(P_i, Q_i)$ e $v(P_i, Q_i)$ não dependam explicitamente do tempo, e usando a regra da cadeia,

$$\frac{\partial u}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial u}{\partial Q_j} \frac{\partial Q_j}{\partial q_i} + \frac{\partial u}{\partial P_j} \frac{\partial P_j}{\partial q_i} \right), \quad (3.93)$$

$$\frac{\partial u}{\partial p_i} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial u}{\partial Q_j} \frac{\partial Q_j}{\partial p_i} + \frac{\partial u}{\partial P_j} \frac{\partial P_j}{\partial p_i} \right), \quad (3.94)$$

com expressões análogas para as derivadas de v . Inserindo todas elas em (3.72)

$$\begin{aligned} \{u, v\}_{(p,q)} &= \sum_{i=1}^n \left\{ \left[\sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial u}{\partial Q_j} \frac{\partial Q_j}{\partial q_i} + \frac{\partial u}{\partial P_j} \frac{\partial P_j}{\partial q_i} \right) \right] \left[\sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial v}{\partial Q_k} \frac{\partial Q_k}{\partial p_i} + \frac{\partial v}{\partial P_k} \frac{\partial P_k}{\partial p_i} \right) \right] - \right. \\ &\quad \left. \left[\sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial v}{\partial Q_j} \frac{\partial Q_j}{\partial q_i} + \frac{\partial v}{\partial P_j} \frac{\partial P_j}{\partial q_i} \right) \right] \left[\sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial u}{\partial Q_k} \frac{\partial Q_k}{\partial p_i} + \frac{\partial u}{\partial P_k} \frac{\partial P_k}{\partial p_i} \right) \right] \right\}, \\ &= \sum_{j,k} \frac{\partial u}{\partial Q_j} \frac{\partial v}{\partial P_k} \underbrace{\sum_i \left(\frac{\partial Q_j}{\partial q_i} \frac{\partial P_k}{\partial p_i} - \frac{\partial Q_j}{\partial p_i} \frac{\partial P_k}{\partial q_i} \right)}_{=\{Q_j, P_k\}=\delta_{jk}} - \sum_{j,k} \frac{\partial u}{\partial P_j} \frac{\partial v}{\partial Q_k} \underbrace{\sum_i \left(\frac{\partial Q_k}{\partial q_i} \frac{\partial P_j}{\partial p_i} - \frac{\partial Q_k}{\partial p_i} \frac{\partial P_j}{\partial q_i} \right)}_{=\{Q_k, P_j\}=\delta_{kj}} + \\ &\quad \sum_{j,k} \frac{\partial u}{\partial Q_j} \frac{\partial v}{\partial Q_k} \underbrace{\sum_i \left(\frac{\partial Q_j}{\partial q_i} \frac{\partial Q_k}{\partial p_i} - \frac{\partial Q_j}{\partial p_i} \frac{\partial Q_k}{\partial q_i} \right)}_{=\{Q_j, Q_k\}=0} + \sum_{j,k} \frac{\partial u}{\partial P_j} \frac{\partial v}{\partial P_k} \underbrace{\sum_i \left(\frac{\partial P_j}{\partial q_i} \frac{\partial P_k}{\partial p_i} - \frac{\partial P_j}{\partial p_i} \frac{\partial P_k}{\partial q_i} \right)}_{=\{P_j, P_k\}=0}, \end{aligned}$$

onde usamos (3.90)-(3.92). As deltas de Krönecker permitem reduzir as somatórias duplas (em j e k) a uma única somatória, que é

$$\{u, v\}_{(p,q)} = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial u}{\partial Q_k} \frac{\partial v}{\partial P_k} - \frac{\partial v}{\partial P_k} \frac{\partial u}{\partial Q_k} \right) = \{u, v\}_{(P,Q)}, \quad (3.95)$$

como queríamos demonstrar. Os colchetes de Poisson são exemplos de *invariantes canônicos*, ou seja, quantidades invariantes sob transformações canônicas.

3.4 Transformações de contato infinitesimais

A transformação identidade

$$Q_i = q_i, \quad P_i = p_i, \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (3.96)$$

é canônica e corresponde à seguinte função geratriz de segunda espécie

$$F_2(q_i, P_i) = \sum_{j=1}^n q_j P_j. \quad (3.97)$$

Uma transformação de contato infinitesimal é definida como uma perturbação da transformação identidade, por meio da função geratriz

$$F_2(q_i, P_i) = \sum_{j=1}^n q_j P_j + \varepsilon G(q_i, P_i, t), \quad (3.98)$$

onde $\varepsilon \ll 1$ e G é uma função que define a transformação de contato. As equações dessa transformação canônica são dadas por (3.16)-(3.17)

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}, \quad (3.99)$$

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i}, \quad (3.100)$$

de modo que as transformações infinitesimais dos momenta e das coordenadas são escritas como

$$\delta p_i = P_i - p_i = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}, \quad (3.101)$$

$$\delta q_i = Q_i - q_i = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i}. \quad (3.102)$$

Usando (3.99) e a regra da cadeia,

$$\frac{\partial G}{\partial P_i} = \frac{\partial G}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial P_i} = \frac{\partial G}{\partial p_i} \left(1 + \varepsilon \frac{\partial^2 G}{\partial p_i \partial q_i} \right) = \frac{\partial G}{\partial p_i} + o(\varepsilon), \quad (3.103)$$

de tal sorte que (3.100) fica

$$Q_i = q_i + \varepsilon \left(\frac{\partial G}{\partial p_i} + o(\varepsilon) \right) = q_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} + o(\varepsilon^2). \quad (3.104)$$

Desprezando os termos de ordem ε^2 ou superiores, a variação correspondente é

$$\delta q_i = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}. \quad (3.105)$$

Por outro lado, calculando os colchetes de Poisson da função geratriz com as coordenadas e os momenta, temos

$$\{q_i, G\} = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial G}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \frac{\partial G}{\partial q_k} \right) = \sum_k \delta_{ik} \frac{\partial G}{\partial p_k} = \frac{\partial G}{\partial p_i}, \quad (3.106)$$

$$\{p_i, G\} = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{\partial G}{\partial p_k} - \frac{\partial p_i}{\partial p_k} \frac{\partial G}{\partial q_k} \right) = -\sum_k \delta_{ik} \frac{\partial G}{\partial q_k} = -\frac{\partial G}{\partial q_i}, \quad (3.107)$$

donde é possível expressar (3.101) e (3.105) como

$$\delta p_i = \varepsilon \{p_i, G\}, \quad (3.108)$$

$$\delta q_i = \varepsilon \{q_i, G\}. \quad (3.109)$$

Vamos explorar alguns casos particulares destas relações. Se $G = p_i$ então

$$\delta p_i = \varepsilon \{p_i, p_i\} = 0, \quad (3.110)$$

$$\delta q_i = \varepsilon \{q_i, p_i\} = \varepsilon, \quad (3.111)$$

de forma que o momentum p_i é o gerador de translações espaciais infinitesimais.

Em segundo lugar, se escolhermos $G = H$ e $\varepsilon = dt$, as variações dos momenta e coordenadas são, respectivamente,

$$\delta p_i = dt \{p_i, H\} = dt \dot{p}_i = dp_i, \quad (3.112)$$

$$\delta q_i = dt \{q_i, H\} = dt \dot{q}_i = dq_i, \quad (3.113)$$

onde usamos (3.83) e (3.84). Nos primeiros membros das equações acima temos as variações em p_i e q_i devido à transformação de contato infinitesimal. Nos segundos membros temos as mesmas variações num intervalo de tempo infinitesimal. Portanto podemos encarar a Hamiltoniana como a geradora da evolução temporal do sistema. Em outras palavras, as transformações de contato infinitesimais correspondem ao próprio movimento do sistema, para um intervalo de tempo infinitesimal.

3.4.1 Momentum angular e rotações infinitesimais

Outra aplicação consiste em escolher G como uma componente do momentum angular $\ell = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Para a componente z do momentum angular, por exemplo, $\varepsilon = \delta\theta$ é um ângulo infinitesimal correspondente a uma rotação em torno do eixo z , com

$$\ell_z = xp_y - yp_x. \quad (3.114)$$

Então (3.108) nos dá

$$\delta p_x = \varepsilon \{p_x, \ell_z\} = \delta\theta \{p_x, (xp_y - yp_x)\} = \delta\theta (\{p_x, xp_y\} - \{p_x, yp_x\}) \quad (3.115)$$

Usando a propriedade (3.76) e os colchetes de Poisson fundamentais dados por (3.79)-(3.81), obtemos

$$\{p_x, xp_y\} = -x\{p_y, p_x\} - p_y\{x, p_x\} = -p_y, \quad (3.116)$$

$$\{p_x, yp_x\} = -y\{p_x, p_x\} - p_x\{y, p_x\} = 0, \quad (3.117)$$

tal que

$$\delta p_x = -\delta\theta p_y. \quad (3.118)$$

Analogamente teremos, para outras componentes dos momenta e coordenadas, que

$$\delta p_y = \delta\theta p_x, \quad \delta p_z = 0, \quad (3.119)$$

$$\delta x = -\delta\theta y, \quad \delta y = \delta\theta x, \quad \delta z = 0. \quad (3.120)$$

Expressando estas relações em termos matriciais, teremos

$$\begin{pmatrix} \delta p_x \\ \delta p_y \\ \delta p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\delta\theta & 0 \\ \delta\theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} \equiv \mathbf{A} \cdot \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} \quad (3.121)$$

$$\begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\delta\theta & 0 \\ \delta\theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \equiv \mathbf{A} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (3.122)$$

Para compreendermos o significado da matriz \mathbf{A} , relembremos a matriz de rotação de coordenadas, de um ângulo θ finito, em torno do eixo z :

$$\mathbf{R}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.123)$$

de modo que as coordenadas do sistema rodado, em termos das coordenadas do sistema original, tenham a seguinte dependência

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \mathbf{R}(\theta) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (3.124)$$

Para rotações infinitesimais, os primeiros termos das expansões em série fornecem

$$\cos(\delta\theta) \approx 1, \quad \sin(\delta\theta) \approx \delta\theta,$$

com a respectiva matriz de rotação

$$\mathbf{R}(\delta\theta) = \begin{pmatrix} 1 & -\delta\theta & 0 \\ \delta\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\delta\theta & 0 \\ \delta\theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{I} + \mathbf{A}, \quad (3.125)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem 3.

Tendo em vista que

$$\delta x = x' - x, \quad \delta y = y' - y, \quad \delta z = z' - z,$$

expressamos (3.126) como

$$\begin{pmatrix} x + \delta x \\ y + \delta y \\ z + \delta z \end{pmatrix} = \mathbf{R}(\delta\theta) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = (\mathbf{A} + \mathbf{I}) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (3.126)$$

onde usamos (3.125). Podemos verificar facilmente que esta relação implica em (3.122), de maneira que a componente z do momentum angular é o gerador de rotações infinitesimais em torno do eixo z . Conclusões semelhantes valem para as outras componentes de ℓ .

3.5 Equação da continuidade

No capítulo anterior (cf. seção 2.7), vimos que uma descrição conveniente para sistemas com um grau de liberdade é o plano de fase, ou seja, o gráfico do momentum *versus* coordenada. Para

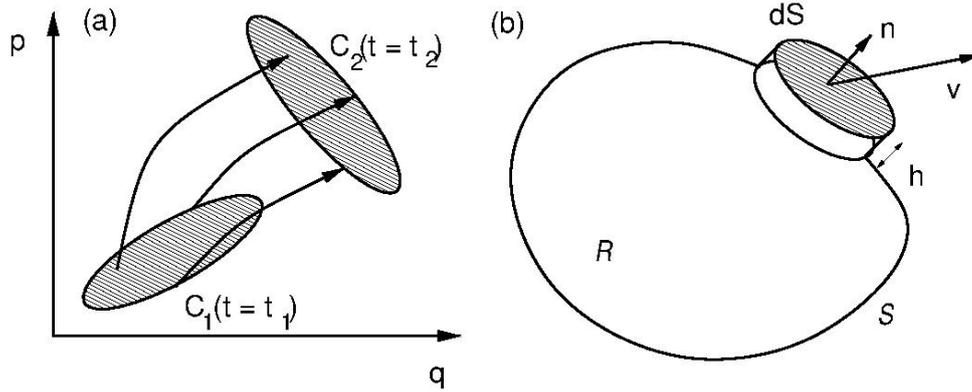


Figura 3.2: (a) Evolução de regiões no plano de fase. (b) Disco infinitesimal na superfície de uma região limitada do espaço de fase.

um número n arbitrário de graus de liberdade generalizamos esta ideia definindo um espaço de fase $2n$ -dimensional, cujas coordenadas são (p_i, q_i) , onde $i = 1, 2, \dots, n$. O elemento de volume no espaço de fase será denotado

$$d\omega = dp_1 dq_1 \dots dp_n dq_n = \prod_{i=1}^n dp_i dq_i. \quad (3.127)$$

O estado de um sistema mecânico é representado no espaço de fase por um único ponto, de coordenadas (p_i, q_i) , a que chamaremos *ponto representativo*. A evolução temporal do sistema é, assim, representada por uma trajetória de fase, determinada pela solução das equações de Hamilton correspondentes

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (3.128)$$

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.129)$$

Dado o estado do sistema num tempo inicial $t = 0$, representado pelo ponto de coordenadas $(p_i(0), q_i(0))$ no espaço de fase, haverá uma e somente uma trajetória de fase passando por este ponto, devido ao teorema de existência e unicidade das soluções das equações de Hamilton (3.128)-(3.129).

Uma consequência deste teorema é a transformação de regiões no espaço de fase limitadas por contornos fechados. No caso bidimensional, por exemplo, seja uma fronteira C_1 , que limita um conjunto de condições iniciais no tempo t_1 . A fronteira C_1 irá se transformar numa fronteira C_2 no tempo t_2 , e que limita o mesmo conjunto de condições iniciais [Fig. 7.27(a)].

Desejamos investigar a evolução temporal de conjuntos de pontos no espaço de fase. Estes pontos podem ser encarados como estados diferentes de um mesmo sistema mecânico, formando um *ensemble* na linguagem da Mecânica Estatística [22]. Neste contexto, definimos uma densidade de pontos no espaço de fase $\rho(p_i, q_i, t)$, tal que $\rho(p_i, q_i, t) d\omega$ representa a probabilidade de encontrarmos um ponto no elemento de volume $d\omega$ do espaço de fase centrado no ponto de coordenadas (p_i, q_i) , no tempo t .

A condição de normalização das probabilidades exige, portanto, que

$$\int d\omega \rho(p_i, q_i, t) = 1, \quad (3.130)$$

onde a integração se estende sobre toda a região do espaço de fase energeticamente acessível ao sistema. Portanto, a probabilidade associada a uma região limitada \mathcal{R} do espaço de fase é

$$\int_{\mathcal{R}} d\omega \rho(p_i, q_i, t), \quad (3.131)$$

e que pode ser interpretada como o número relativo de pontos representativos no interior desta região, no tempo t .

Supondo que a região \mathcal{R} seja limitada por uma superfície fechada \mathcal{S} , seja um disco infinitesimal de área dS projetando-se da superfície \mathcal{S} ao longo da direção do vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}$ perpendicular à superfície do disco [Fig. 7.27(b)]. A espessura do disco será

$$h = (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) dt, \quad (3.132)$$

onde a “velocidade” \mathbf{v} dos pontos representativos no espaço de fase é o vetor $2n$ -dimensional de componentes $v_i = (\dot{p}_i, \dot{q}_i)$, com $i = 1, 2, \dots, n$. Em vista de (3.128)-(3.129), esta velocidade é o próprio campo vetorial definido pelas equações de Hamilton.

O fluxo, ou seja, o número de pontos fluindo através da superfície do disco por unidade de tempo é

$$d\Phi = \frac{\rho(hdS)}{dt} = \rho(\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) dS, \quad (3.133)$$

de modo que, se $d\Phi > 0$ o fluxo é para fora do disco (efluxo), enquanto se $d\Phi < 0$ será para dentro (influxo). O fluxo líquido de pontos através da superfície \mathcal{S} é dado, portanto, pela integral

$$\Phi = \oint_{\mathcal{S}} dS \rho(\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}). \quad (3.134)$$

Usando o teorema do divergente

$$\Phi = \int_{\mathcal{R}} d\omega \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}), \quad (3.135)$$

onde o divergente do campo vetorial no espaço de fase é

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial(\rho \dot{p}_i)}{\partial p_i} + \frac{\partial(\rho \dot{q}_i)}{\partial q_i} \right). \quad (3.136)$$

Como não há criação nem destruição de pontos no espaço de fase de um sistema Hamiltoniano, a variação deste número, para um volume fixo \mathcal{R} , deve-se unicamente ao fluxo líquido de pontos pela superfície fechada \mathcal{S} que limita esta região. Logo

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{R}} d\omega \rho &= \int_{\mathcal{R}} d\omega \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}), \\ \int_{\mathcal{R}} d\omega \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \right) &= 0, \end{aligned} \quad (3.137)$$

já que a região \mathcal{R} é fixa no tempo. Para que a integral seja igual a zero para uma região \mathcal{R} arbitrária, o integrando deve ser identicamente nulo, levando-nos à condição

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (3.138)$$

que é uma “equação de continuidade” para a evolução de conjuntos de pontos no espaço de fase, representando a conservação do número de pontos representativos.

3.6 Teorema de Liouville

Abrindo o divergente no espaço de fase, dado por (3.136), temos que

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^n \left(\rho \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} + \rho \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} \right). \quad (3.139)$$

Como a evolução temporal dos pontos no espaço de fase é governada pelas equações de Hamilton (3.128)-(3.129) então

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) &= \sum_{i=1}^n \left(\rho \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \rho \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \left\{ -\rho \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \rho \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} + \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\} \end{aligned} \quad (3.140)$$

$$= \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right\} = \{\rho, H\}, \quad (3.141)$$

onde usamos a definição (3.72) dos colchetes de Poisson.

Substituindo (3.141) na equação de continuidade (3.138) ficamos com

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = 0, \quad (3.142)$$

cujo primeiro membro é, de acordo com (3.85), igual à derivada total da densidade em relação ao tempo,

$$\frac{d\rho}{dt} = 0, \quad (3.143)$$

Portanto a densidade de pontos no espaço de fase é uma constante do movimento, resultado este conhecido como *teorema de Liouville*.

A obtenção da equação de continuidade (3.138) motiva uma analogia entre o movimento dos pontos representativos no espaço de fase e o escoamento de um fluido no espaço de configuração. O teorema de Liouville implica, neste caso, que tal escoamento é incompressível.

A densidade no espaço de fase é definida como o número de pontos representativos $d\mathcal{N}$ por unidade de volume, ou seja, $\rho = d\mathcal{N}/d\omega$, onde $d\omega$ é dada por (3.127). Pelo teorema de Liouville, representado pela equação (3.143), a densidade é uma constante. Como o número de pontos numa certa região do espaço de fase $\mathcal{N} = \int_{\mathcal{R}} d\omega \rho$ é conservado, então o volume da região correspondente $\omega = \int_{\mathcal{R}} d\omega$ também é conservado com o passar do tempo.

Um caso particular importante é o de um espaço de fase bidimensional, no qual as áreas de conjuntos de condições iniciais são conservadas. Podemos, nesse caso, demonstrar de maneira direta a conservação de áreas no plano de fase: sejam $(p(1), q(1))$ e $(p(0), q(0))$ dois pontos representativos nos instantes de tempo t_1 e t_0 , respectivamente [Fig. 3.3]. Em outras palavras, tomamos dois pontos sobre uma mesma trajetória de fase, em tempos diferentes.

Se $t_1 = t_0 + \delta t$, onde $\delta t \ll t_0$, expandimos $p(1)$ e $q(1)$ em série de Taylor até termos

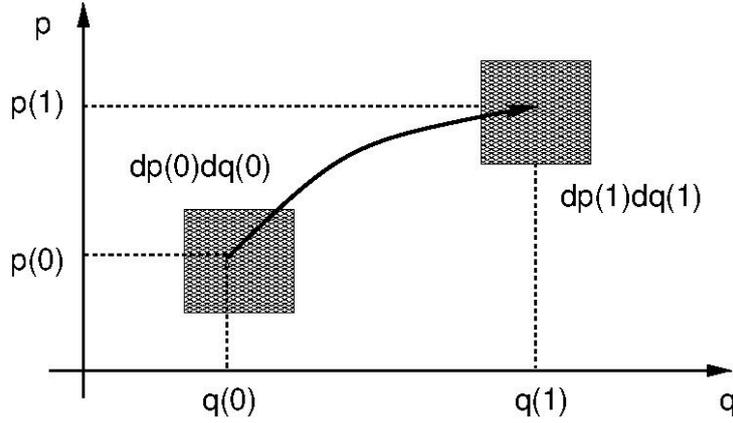


Figura 3.3: Transformação de elementos de área no plano de fase.

quadráticos ou de ordem superior,

$$\begin{aligned} p(1) &= p(t_0 + \delta t) = p(0) + \delta t \frac{dp(0)}{dt_0} + o(\delta t)^2, \\ &= p(0) - \delta t \frac{\partial H(p(0), q(0), t_0)}{\partial q(0)} + o(\delta t)^2, \end{aligned} \quad (3.144)$$

$$\begin{aligned} q(1) &= q(t_0 + \delta t) = q(0) + \delta t \frac{dq(0)}{dt_0} + o(\delta t)^2, \\ &= q(0) + \delta t \frac{\partial H(p(0), q(0), t_0)}{\partial p(0)} + o(\delta t)^2, \end{aligned} \quad (3.145)$$

onde usamos as equações de Hamilton. Os elementos de área no plano de fase nos tempos t_0 e t_1 estão conectados pela relação conhecida do cálculo

$$dp(1)dq(1) = |J|dp(0)dq(0), \quad (3.146)$$

onde o Jacobiano da transformação $(p(0), q(0)) \rightarrow (p(1), q(1))$ é

$$\begin{aligned} J &= \frac{\partial(p(1), q(1))}{\partial(p(0), q(0))} = \begin{vmatrix} \partial p(1)/\partial p(0) & \partial q(1)/\partial p(0) \\ \partial p(1)/\partial q(0) & \partial q(1)/\partial q(0) \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} 1 - \delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p(0)\partial q(0)} & \delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p(0)^2} \\ -\delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q(0)^2} & 1 + \delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q(0)\partial p(0)} \end{vmatrix} + o(\delta t)^2 \\ &= 1 + o(\delta t)^2 \end{aligned} \quad (3.147)$$

Consideramos, agora, um intervalo de tempo finito $T = t_f - t_i$, subdividido em N intervalos de duração $\delta t = T/N$. Aplicando (3.146) a cada sub-intervalo, a combinação de todos eles fornece, no tempo $T = N\delta t$,

$$\begin{aligned} dp(N)dq(N) &= |J|^N dp(0)dq(0) = [1 + o(\delta t)^2]^N dp(0)dq(0), \\ &\approx \left(1 + \left(\frac{T}{N}\right)^2\right)^N dp(0)dq(0) \approx \left(1 + N\frac{T^2}{N^2}\right) dp_0dq_0, \end{aligned} \quad (3.148)$$

já que $T/N \ll 1$, de tal forma que seja possível empregar a aproximação binomial: $(1+x)^n \approx 1+nx$, quando $x \ll 1$.

No limite $N \rightarrow \infty$ teremos

$$dp(N)dq(N) = dp(0)dq(0), \quad (3.149)$$

tal que os elementos de área são conservados para intervalos de tempo finitos. Integrando estes elementos, resulta que as áreas de conjuntos de pontos representativos no plano de fase também são conservadas, como esperado.

Pelo teorema de Liouville, o volume de uma região $\mathcal{R}(t)$ do espaço de fase num instante de tempo t fixo,

$$I_n = \int_{\mathcal{R}(t)} d\omega = \int_{\mathcal{R}(t)} \prod_{i=1}^n dp_i dq_i \quad (3.150)$$

é uma constante do movimento. Como a Hamiltoniana do sistema gera uma translação temporal infinitesimal, por meio de uma transformação de contato então, sob este ponto de vista, a constante de movimento também é um invariante canônico. Portanto, dada uma transformação canônica $(p_i, q_i) \rightarrow (P_i, Q_i)$, o volume da região \mathcal{R} é um invariante canônico integral, dado por

$$I_n = \int_{\mathcal{R}(t)} \prod_{i=1}^n dP_i dQ_i, \quad (3.151)$$

nas novas variáveis.

A expressão I_n é o n -ésimo membro de uma família de invariantes canônicos integrais introduzidos por Poincaré [30]

$$I_1 = \int \int_{S_2(t)} \sum_{i=1}^n dp_i dq_i, \quad (3.152)$$

$$I_2 = \int \int \int \int_{S_4(t)} \sum_{i \neq k} dp_i dq_i dp_k dq_k, \quad (3.153)$$

$\vdots \quad \quad \quad \vdots$

$$I_n = \int \int \int \int_{S_{2n}(t)} \prod_{i=1}^n dp_i dq_i, \quad (3.154)$$

onde $S_2(t)$ é uma superfície bidimensional no espaço de fase, a um tempo fixo t ; $S_4(t)$ é uma “superfície” (ou variedade) quadridimensional, etc. De maneira geral, o símbolo $S_{2n}(t)$ indica uma região $\mathcal{R}(t)$ do espaço de fase $2n$ -dimensional em um dado tempo.

Aplicando o teorema de Stokes no invariante integral (3.152) obtemos o chamado *invariante integral relativo*

$$\mathcal{J}_1 = \oint_{C(t)} \sum_{i=1}^n p_i dq_i, \quad (3.155)$$

onde C é um caminho fechado no espaço de fase num tempo fixo t . De forma geral, a aplicação do Teorema de Stokes reduz a ordem de integração por uma unidade, transformando o invariante integral I_k para uma dada região S_{2k} num invariante integral relativo \mathcal{J}_k para o contorno $(2k - 1)$ -dimensional dessa região [17].

3.7 Espaço de fase estendido

Partindo do princípio de Hamilton na forma (3.6), mudamos a variável de integração do tempo t para um parâmetro ζ que seja independente da variação expressa pelo símbolo δ :

$$\delta \left\{ \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} d\zeta \left[\sum_{i=1}^n p_i \frac{dq_i}{d\zeta} - H \frac{dt}{d\zeta} \right] \right\} = 0, \quad (3.156)$$

onde ζ_1 e ζ_2 caracterizam dois pontos fixos no espaço de fase.

Com este artifício de cálculo podemos absorver o tempo como uma das variáveis canônicas, fazendo a seguinte transformação de variáveis

$$P_i = p_i, \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (3.157)$$

$$Q_i = q_i, \quad (3.158)$$

$$P_{n+1} = -H, \quad (3.159)$$

$$Q_{n+1} = t, \quad (3.160)$$

o que nos permite reescrever o princípio variacional (3.156) como

$$\delta \left\{ \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} d\zeta \sum_{i=1}^{n+1} P_i \frac{dQ_i}{d\zeta} \right\} = 0. \quad (3.161)$$

A transformação (3.157)-(3.160) é canônica, associada à função geratriz de segunda espécie

$$F_2(P_i, q_i, t) = \sum_{i=1}^n P_i q_i + P_{n+1} t. \quad (3.162)$$

As equações da transformação canônica correspondente são

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i, \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (3.163)$$

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i, \quad (3.164)$$

$$Q_{n+1} = \frac{\partial F_2}{\partial P_{n+1}} = t, \quad (3.165)$$

$$K(P_i, Q_i) = H(p_i, q_i, t) - H, \quad (3.166)$$

que, naturalmente, coincidem com (3.157)-(??).

A transformação canônica que executamos permite-nos trabalhar num espaço de fase estendido de dimensão $n + 1$ descrito pelas variáveis (P_i, Q_i) , e onde as trajetórias de fase são parametrizadas por ζ ao invés do tempo. As equações de Hamilton no espaço de fase estendido são, portanto,

$$\frac{dP_i}{d\zeta} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}, \quad (i = 1, 2, \dots, n+1), \quad (3.167)$$

$$\frac{dQ_i}{d\zeta} = \frac{\partial K}{\partial P_i}. \quad (3.168)$$

Observe que o Kamiltoniano não depende explicitamente do tempo t por construção. Assim a Eq. (3.167), para $i = n + 1$, lê-se

$$-\frac{dH}{d\zeta} = -\frac{\partial K}{\partial t} = 0, \quad (3.169)$$

donde H é uma constante do movimento no espaço de fase estendido. Analogamente (3.168) fornece

$$\frac{dt}{d\zeta} = -\frac{\partial K}{\partial H} = 1, \quad (3.170)$$

donde $t(\zeta) = \zeta$.

Uma conclusão imediata é a de que uma Hamiltoniana de um sistema com n graus de liberdade e dependente explicitamente do tempo, $H(p_i, q_i, t)$, é equivalente a uma Hamiltoniana para $n+1$ graus de liberdade porém independente do tempo: $K(P_i, Q_i)$. O momentum canonicamente conjugado ao tempo é $-H$. Um exemplo é

$$H(p, q, t) = \frac{1}{2}p^2 - a \cos q - b \cos(q - t), \quad (3.171)$$

onde a e b são constantes. A transformação canônica para o espaço de fase estendido é $Q_1 = q$, $Q_2 = t$, $P_1 = p$ e $P_2 = -H$, de sorte que (3.166) nos dá a Kamiltoniana no espaço de fase estendido (de duas dimensões), a saber:

$$\begin{aligned} K(P_1, P_2; Q_1, Q_2) &= H(p, q, t) - H \\ &= \frac{1}{2}P_1^2 + P_2 - a \cos Q_1 - b \cos(Q_1 - Q_2), \end{aligned} \quad (3.172)$$

e que, agora, não depende explicitamente do tempo.

3.8 Variável de ação

Num sistema mecânico que apresenta oscilações periódicas em seu i -ésimo grau de liberdade, e é descrito por uma Hamiltoniana independente do tempo, definimos a *variável de ação* para este grau de liberdade como

$$J_i = \frac{1}{2\pi} \oint p_i dq_i, \quad (3.173)$$

onde a integral se estende sobre um ciclo completo de oscilação.

Por outro lado, o invariante integral relativo (3.155), no espaço de fase estendido, é dado por ¹

$$\mathcal{J}_1 = \oint_{C(\zeta)} \sum_{i=1}^{n+1} p_i dq_i = \oint_{C(\zeta)} \left(\sum_{i=1}^n p_i dq_i - H dt \right) \quad (3.174)$$

onde $C(\zeta)$ é um caminho fechado no espaço de fase estendido, num dado valor fixo do parâmetro ζ , e que portanto inclui variações temporais. Como a escolha de ζ é arbitrária, podemos selecionar o caminho C tal que parte dele coincida com a trajetória do sistema no espaço de fase. Se a Hamiltoniana do sistema não depender explicitamente do tempo ela será uma constante do movimento e, portanto, pode ser tirada para fora da integral em (3.174):

$$\mathcal{J}_1 = \oint_C \sum_{i=1}^n p_i dq_i - H \oint_C dt. \quad (3.175)$$

Como $\oint_C dt = 0$ para qualquer caminho fechado, resulta que

$$\oint_C \sum_{i=1}^n p_i dq_i = \text{const.} \quad (3.176)$$

Dividindo, agora, o caminho C em duas partes, conforme a Fig. 3.4. Para o i -ésimo grau de liberdade, de (3.176), resulta que

$$\oint_C p_i dq_i = \int_{C_1} p_i dq_i + \int_{C_2} p_i dq_i = \text{const.} \quad (3.177)$$

¹Também chamado de invariante de Poincaré-Cartan.

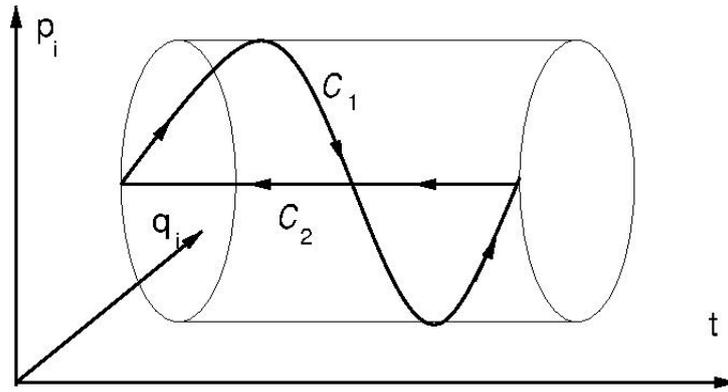


Figura 3.4: Caminho fechado no espaço de fase estendido.

onde C_1 é um caminho ao longo de um ciclo completo de oscilação, enquanto C_2 é escolhida tal que q_i é constante, ou $dq_i = 0$. Assim, de (3.173) concluímos que

$$\int_{C_1} p_i dq_i = 2\pi J_i = \text{const.} \quad (3.178)$$

donde a integral de ação é proporcional ao invariante integral relativo. Ambos são, assim, tanto constantes de movimento como invariantes canônicos, se a Hamiltoniana não depender explicitamente do tempo. A constância da integral de ação será usada, no próximo capítulo, na definição das chamadas variáveis de ação e ângulo.

3.9 Integração numérica das equações de Hamilton

Uma característica bastante comum aos problemas da Dinâmica Hamiltoniana Aplicada é o fato de não existirem soluções analíticas para as equações de Hamilton, especialmente quando estas forem não-lineares. Nestes casos recorreremos à solução numérica das equações diferenciais ordinárias correspondentes, utilizando técnicas computacionais. Nesta Seção mostraremos de forma breve algumas delas, enfatizando aquelas que preservem propriedades fundamentais do sistema Hamiltoniano.

3.9.1 Método de Euler explícito

Por simplicidade, iremos limitar nossa apresentação a sistemas com um grau de liberdade, descritos pela Hamiltoniana $H(p, q)$, para os quais as equações de Hamilton são

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(p, q)}{\partial q}, \quad (3.179)$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H(p, q)}{\partial p}, \quad (3.180)$$

com as seguintes condições iniciais: $p(t_0) = p_0$ e $q(t_0) = q_0$. Pelo teorema de existência e unicidade das equações diferenciais ordinárias, sabemos que existe uma e somente uma solução $(p(t), q(t))$ que passa pela condição inicial (p_0, q_0) .

Em termos computacionais, desejamos uma solução para um intervalo de tempo $t_0 \leq t \leq t_f$. Para isso, o dividimos em N sub-intervalos de duração

$$h = \frac{t_f - t_0}{N} \quad (3.181)$$

chamada *passo de integração*. Uma solução numérica para o sistema (3.179)-(3.180) consiste na sequência de pontos

$$p_n = p(t = t_0 + nh), \quad (3.182)$$

$$q_n = q(t = t_0 + nh), \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N), \quad (3.183)$$

a intervalos de tempo constantes.

Se o passo h de integração for suficientemente pequeno, podemos expandir o ponto $p_1 = p(t = t_0 + h)$ em série de Taylor e reter apenas o termo linear

$$p_1 \approx p(t = t_0) + h \left(\frac{dp}{dt} \right)_{t=t_0} = p_0 - h \left(\frac{\partial H}{\partial q} \right)_{t=t_0}, \quad (3.184)$$

com uma expressão análoga para q_1 . De forma geral, para todos os demais pontos do intervalo $[t_0, t_f]$, teremos as relações de recorrência

$$p_{n+1} = p_n - h \frac{\partial H(p_n, q_n)}{\partial q_n}, \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N) \quad (3.185)$$

$$q_{n+1} = q_n + h \frac{\partial H(p_n, q_n)}{\partial p_n}, \quad (3.186)$$

que são as equações do chamado *método de Euler explícito*.

Os pontos (p_n, q_n) são aproximações numéricas da solução exata $(p(t_n), q(t_n))$ em $t_n = t_0 + nh$, quer dizer, $(p_n, q_n) \approx (p(t_n), q(t_n))$. Observe que os valores de (p_n, q_n) dependem do passo de integração h , de modo que o erro cometido na n -ésima etapa do procedimento é $p(t_0 + nh) - p_n$. Pode-se mostrar que o erro para o método de Euler explícito cresce com o passo h . Assim, quanto menor h , mais lentamente o erro cometido vai se propagando com o passar do tempo. Dizemos, por isso, que o método de Euler é de primeira ordem.

Vamos considerar, como exemplo, a Hamiltoniana do pêndulo para $F = G = 1$:

$$H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 - \cos q. \quad (3.187)$$

As expressões (3.185) e (3.186) levam ao sistema de relações de recorrência,

$$p_{n+1} = p_n - h \sin q_n, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.188)$$

$$q_{n+1} = q_n + hp_n, \quad (3.189)$$

onde devemos especificar as condições iniciais (p_0, q_0) para obter os pontos (p_n, q_n) da solução desejada, com $n = 1, 2, \dots, N$.

3.9.2 Método de Euler implícito

Uma variante mais precisa do método de Euler consiste em calcular as derivadas da Hamiltoniana, não no ponto atual (p_n, q_n) , mas sim no ponto seguinte, (p_{n+1}, q_{n+1}) . Com esta modificação, as equações (3.185)-(3.186) tornam-se

$$p_{n+1} = p_n - h \frac{\partial H(p_{n+1}, q_{n+1})}{\partial q_{n+1}}, \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N) \quad (3.190)$$

$$q_{n+1} = q_n + h \frac{\partial H(p_{n+1}, q_{n+1})}{\partial p_{n+1}}, \quad (3.191)$$

tal que (p_{n+1}, q_{n+1}) são determinados de maneira implícita em função de (p_n, q_n) , o que demanda um procedimento numérico adicional para explicitar (p_{n+1}, q_{n+1}) em função de (p_n, q_n) .

Por exemplo, se q_{n+1} for determinado implicitamente por uma equação da forma

$$f(q_{n+1}) = 0, \quad (3.192)$$

encontraremos o valor de q_{n+1} achando a raiz da função $f(x)$, o que pode ser feito usando o método de Newton-Raphson. Este é um método de aproximações sucessivas para determinar as raízes simples x^* , tal que $f(x^*) = 0$, com $f'(x^*) \neq 0$. Iniciamos por um “chute” inicial x_0 , que pode ser o valor de q_n . A partir dele, as aproximações sucessivas são dadas pela fórmula

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.193)$$

e presumimos que a sequência $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ convirja para a raiz x^* que, por sua vez, passa a ser o valor de q_{n+1} . O teorema de existência e unicidade nos ajuda por garantir que haja uma única raiz a ser determinada.

A convergência do método de Newton-Raphson é usualmente muito rápida. Se escolhermos um chute inicial próximo à raiz, poucas iterações de (3.193) são suficientes para obter um resultado com precisão satisfatória. No entanto, é necessário um certo cuidado pois, se $f'(x_k)$ tiver um valor próximo a zero, os valores de x_k podem divergir, produzindo resultados indesejados.

Voltando ao exemplo do pêndulo (4.97), as equações para o método de Euler implícito serão

$$p_{n+1} = p_n - h \sin q_{n+1}, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.194)$$

$$q_{n+1} = q_n + h p_{n+1}. \quad (3.195)$$

Substituindo p_{n+1} de (3.194) em (3.195) teremos a relação

$$q_{n+1} + h^2 \sin q_{n+1} = q_n + h p_n, \quad (3.196)$$

que determina implicitamente q_{n+1} .

Dadas as condições iniciais (p_0, q_0) , o valor de q_1 é dado por

$$q_1 + h^2 \sin q_1 = q_0 + h p_0 \equiv C, \quad (3.197)$$

onde C é uma constante. Portanto, o valor de q_1 será a raiz da função

$$f(x) = x + h^2 \sin x - C. \quad (3.198)$$

Aplicando $f(x)$ e sua derivada na expressão (3.193) do método de Newton-Raphson teremos a relação de recorrência

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k + h^2 \sin x_k - C}{1 + h^2 \cos x_k}, \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.199)$$

de modo que, após um número suficientemente grande de iterações (100 iterações são mais que suficientes), teremos $q_1 = x^*$. Finalmente, de (3.195),

$$p_1 = p_0 - h \sin q_1, \quad (3.200)$$

e assim por diante.

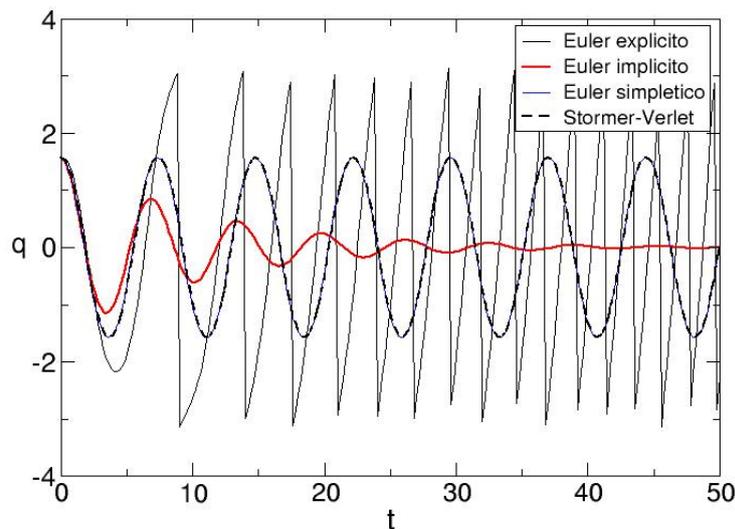


Figura 3.5: Posição do pêndulo em função do tempo para as condições iniciais $q_0 = \pi/2$ e $p_0 = 0$, considerando quatro métodos de integração numérica, todos com o mesmo passo de integração $h = 0,2$.

Embora o método de Euler implícito também seja de primeira ordem, ele costuma dar resultados melhores do que o método explícito. Uma variante consiste em calcular as derivadas da Hamiltoniana nos pontos médios dos intervalos correspondentes

$$\frac{p_n + p_{n+1}}{2}, \quad \frac{q_n + q_{n+1}}{2},$$

levando ao chamado método de Euler implícito de ponto médio. Esta versão é de segunda ordem pois o erro cresce com h^2 . Como, para $h \ll 1$, $h^2 \ll h$, o erro se propaga mais lentamente com o tempo neste tipo de métodos, o que leva a resultados mais precisos.

3.9.3 Método de Euler simplético

Um problema comum aos métodos de Euler descritos anteriormente é que eles não levam em conta algumas propriedades características dos sistemas hamiltonianos:

- Conservação de energia: para sistemas com um grau de liberdade com Hamiltoniana independente do tempo, a energia $E = H(p, q)$ deve ser conservada para quaisquer valores de (p_n, q_n) ;
- Preservação de áreas: para este mesmo tipo de sistemas, as áreas no plano de fase devem ser conservadas, ou seja, $dp_{n+1}dq_{n+1} = dp_n dq_n$ para todos os valores de n [vide Eq. (3.149)].

Voltando ao exemplo do pêndulo, na Figura 3.5 mostramos o resultado da aplicação de alguns métodos de integração numérica das respectivas equações de Hamilton, para as condições iniciais $q_0 = \pi/2$ e $p_0 = 0$, usando o passo de integração $h = 0,2$. Tanto o método explícito

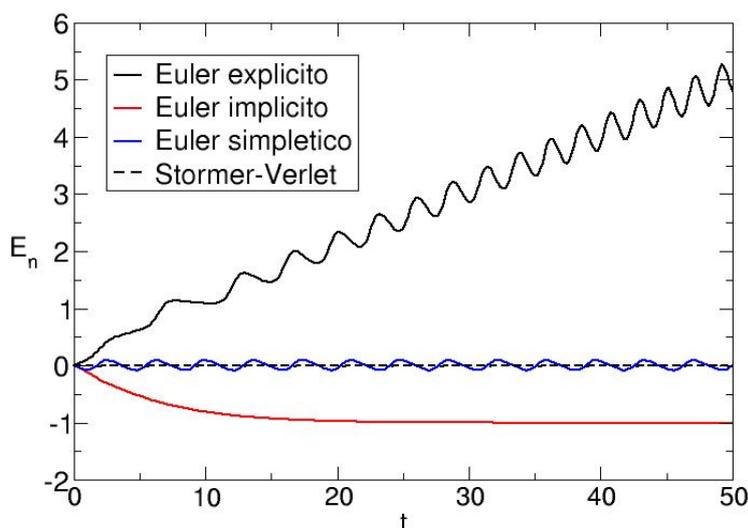


Figura 3.6: Energia do pêndulo em função do tempo para as condições iniciais $q_0 = \pi/2$ e $p_0 = 0$, considerando quatro métodos de integração numérica, todos com o mesmo passo de integração $h = 0,2$.

como o implícito de Euler produzem resultados insatisfatórios, considerando que o esperado seriam oscilações regulares com amplitude q_0 . Embora a evolução de ambos esteja correta para tempos muito pequenos (até $t \sim 2$), o método explícito leva a um aumento indefinido do valor de q , o que indica a presença de rotações, ao invés de librações. Já o método implícito leva a um resultado ainda pior, que é a parada do pêndulo após $t \sim 50$.

Estes resultados indesejáveis também são observados acompanhando a evolução temporal da energia do pêndulo a cada iteração dos métodos empregados,

$$E_n(p_n, q_n) = \frac{1}{2}p_n^2 - \cos q_n \quad (3.201)$$

em termos da energia inicial

$$E_0(p_0, q_0) = \frac{1}{2}p_0^2 - \cos q_0. \quad (3.202)$$

Escolhendo $p_0 = 0$ e $q_0 = \pi/2$ temos $E_0 = 0$. Conforme mostrado na Fig. 3.6, no método de Euler explícito a energia cresce indefinidamente com o tempo, enquanto no método implícito ela tende a seu valor mínimo $E = -1$, correspondente ao repouso do pêndulo.

Métodos de integração numérica de sistemas Hamiltonianos que preservam a energia bem como as áreas no plano de fase são chamados *integradores simpléticos*. O método de Euler simplético tem como princípio a hipótese de que a transformação $(p_n, q_n) \rightarrow (p_{n+1}, q_{n+1})$ é canônica. No contexto da integração numérica, se o passo h é suficientemente pequeno, podemos supor que seja uma transformação de contato infinitesimal, cuja função geratriz de segunda espécie é

$$F_2(p_{n+1}, q_n) = p_{n+1}q_n + hH(p_{n+1}, q_n). \quad (3.203)$$

As equações (3.16)-(3.17) da transformação canônica são

$$p_n = \frac{\partial F_2}{\partial q_n} = p_{n+1} + h \frac{\partial H}{\partial q_n}, \quad (3.204)$$

$$q_{n+1} = \frac{\partial F_2}{\partial p_{n+1}} = q_n + h \frac{\partial H}{\partial p_{n+1}}, \quad (3.205)$$

levam às equações do método de Euler simplético

$$p_{n+1} = p_n - h \frac{\partial H(p_{n+1}, q_n)}{\partial q_n}, \quad (3.206)$$

$$q_{n+1} = q_n + h \frac{\partial H(p_{n+1}, q_n)}{\partial p_{n+1}}. \quad (3.207)$$

Analogamente, usando uma função geratriz de terceira espécie

$$F_3(p_n, q_{n+1}) = -p_n q_{n+1} + hH(p_n, q_{n+1}). \quad (3.208)$$

teremos uma variante do método de Euler simplético cujas equações, de (3.20)-(3.21), são

$$p_{n+1} = p_n - h \frac{\partial H(p_n, q_{n+1})}{\partial q_{n+1}}, \quad (3.209)$$

$$q_{n+1} = q_n + h \frac{\partial H(p_n, q_{n+1})}{\partial p_n}. \quad (3.210)$$

Em ambas as versões, os métodos de Euler simpléticos determinam as variáveis de forma implícita. Quando isto ocorrer, podemos usar o método de Newton-Raphson para calcular o valor da variável desejada. No entanto, se a Hamiltoniana for separável na seguinte forma

$$H(p, q) = T(p) + U(q), \quad (3.211)$$

as equações do método simplético tornam-se explícitas, facilitando o seu uso. Substituindo em (3.206)-(3.207) teremos

$$p_{n+1} = p_n - h \frac{dU}{dq_n}, \quad (3.212)$$

$$q_{n+1} = q_n + h \frac{dT}{dp_{n+1}}. \quad (3.213)$$

e expressões análogas para a sua variante (3.209)-(3.210).

No exemplo do pêndulo, $T(p) = p^2/2$ e $U(q) = -\cos q$, de forma que

$$p_{n+1} = p_n - h \sin q_n, \quad (3.214)$$

$$q_{n+1} = q_n + hp_{n+1}. \quad (3.215)$$

Aplicando estas equações obtemos um resultado bem melhor do que aqueles gerados pelos métodos de Euler explícito e implícito [Fig. 3.5]. As oscilações do pêndulo, para a condição inicial utilizada, têm amplitude constante, exatamente como previsto pela solução exata, que obtivemos no Capítulo I usando funções elípticas de Jacobi [vide a equação (1.104)].

Como, de (3.202), a energia do pêndulo é igual a zero (para as condições iniciais adotadas), vemos na Fig. 3.6 que o método de Euler simplético peca por exibir oscilações da energia em função do tempo em torno de zero, com amplitude da ordem de 0,1, um nível bem acima da precisão numérica utilizada. Resultados melhores podem ser alcançados diminuindo o passo de integração, mas o método a seguir é mais satisfatório.

3.9.4 Método de Störmer-Verlet

É essencialmente a composição de dois métodos de Euler simpléticos: introduzimos, entre (p_n, q_n) e (p_{n+1}, q_{n+1}) , um ponto intermediário $(p_{n+1/2}, q_{n+1/2})$. Inicialmente aplicamos (3.206)-(3.207) com metade do passo de integração, para obter:

$$p_{n+1/2} = p_n - \frac{h}{2} \frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_n)}{\partial q_n}, \quad (3.216)$$

$$q_{n+1/2} = q_n + \frac{h}{2} \frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_n)}{\partial p_{n+1/2}}, \quad (3.217)$$

e mais uma vez:

$$p_{n+1} = p_{n+1/2} - \frac{h}{2} \frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_{n+1})}{\partial q_{n+1}}, \quad (3.218)$$

$$q_{n+1} = q_{n+1/2} + \frac{h}{2} \frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_{n+1})}{\partial p_{n+1/2}}. \quad (3.219)$$

Combinando estas expressões chegamos ao método propriamente dito:

$$p_{n+1/2} = p_n - \frac{h}{2} \frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_n)}{\partial q_n}, \quad (3.220)$$

$$q_{n+1} = q_n + \frac{h}{2} \left\{ \frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_n)}{\partial p_{n+1/2}} + \frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_{n+1})}{\partial p_{n+1/2}} \right\}, \quad (3.221)$$

$$p_{n+1} = p_{n+1/2} - \frac{h}{2} \frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_{n+1})}{\partial q_{n+1}}. \quad (3.222)$$

Uma variante do método é a seguinte:

$$q_{n+1/2} = q_n + \frac{h}{2} \frac{\partial H(p_n, q_{n+1/2})}{\partial p_n}, \quad (3.223)$$

$$p_{n+1} = p_n - \frac{h}{2} \left\{ \frac{\partial H(p_n, q_{n+1/2})}{\partial q_{n+1/2}} + \frac{\partial H(p_{n+1}, q_{n+1/2})}{\partial q_{n+1/2}} \right\}, \quad (3.224)$$

$$q_{n+1} = q_{n+1/2} + \frac{h}{2} \frac{\partial H(p_{n+1}, q_{n+1/2})}{\partial p_{n+1}}. \quad (3.225)$$

Assim como o método de Euler simplético, o método de Störmer-Verlet determina implicitamente as variáveis, em geral. No entanto, se a Hamiltoniana for separável como em (3.211), as equações (3.220)-(3.222) tornam explícita a determinação:

$$p_{n+1/2} = p_n - \frac{h}{2} \frac{dU(q_n)}{dq_n}, \quad (3.226)$$

$$q_{n+1} = q_n + h \frac{dT(p_{n+1/2})}{dp_{n+1/2}}, \quad (3.227)$$

$$p_{n+1} = p_{n+1/2} - \frac{h}{2} \frac{dU(q_{n+1})}{dq_{n+1}}, \quad (3.228)$$

com expressões semelhantes para (3.223)-(3.225).

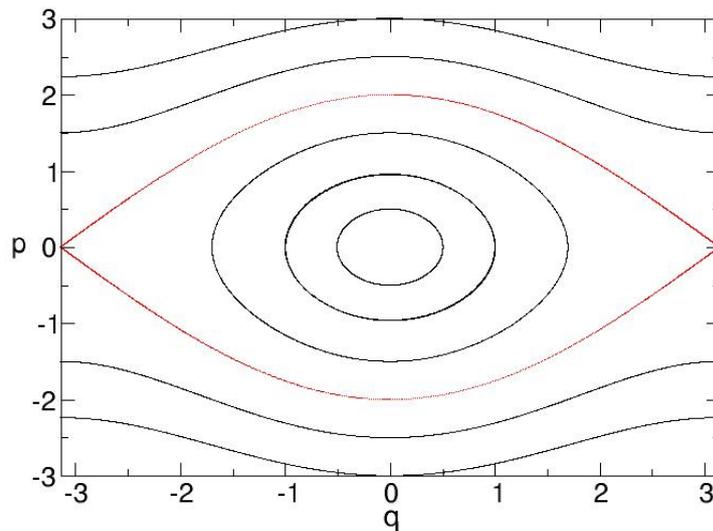


Figura 3.7: Algumas trajetórias no plano de fase do pêndulo para $F = G = 1$, obtidas pela integração numérica das equações de Hamilton, usando o método de Störmer-Verlet.

Retornando ao exemplo do pêndulo, com $T(p) = p^2/2$ e $U(q) = -\cos q$, o método de Störmer-Verlet conduz às relações de recorrência

$$p_{n+1/2} = p_n - \frac{h}{2} \sin q_n, \quad (3.229)$$

$$q_{n+1} = q_n + hp_{n+1/2}, \quad (3.230)$$

$$p_{n+1} = p_{n+1/2} - \frac{h}{2} \sin q_{n+1}. \quad (3.231)$$

O método de Störmer-Verlet é de segunda ordem, pois o erro aumenta com h^2 , propagando-se mais lentamente com o tempo, em relação ao método de Euler simplético. De fato, os resultados para o exemplo do pêndulo são bastante satisfatórios [Fig. 3.5], e a energia é conservada de modo bastante bom, pois as oscilações em torno de zero tem uma amplitude $\sim 10^{-8}$, da ordem da precisão numérica utilizada (ponto flutuante) [Fig. 3.6].

Na Fig. 3.7 mostramos algumas trajetórias de fase para o pêndulo, no caso $F = G = 1$, obtidas a partir do método de Störmer-Verlet com passo $h = 0,01$. Cada trajetória corresponde a uma condição inicial diferente, que foram escolhidas de maneira a evidenciar os três tipos de comportamento característicos do pêndulo: librações (curvas fechadas) em torno do ponto elíptico ($p = 0, q = 0$), rotações (curvas “abertas”), e uma separatriz que conecta os pontos hiperbólicos ($p = 0, q = \pm\pi$).

O estudo de métodos simpléticos de integração das equações de Hamilton aprofunda-se consideravelmente a partir deste ponto. Remeteremos o leitor interessado às referências.... para maiores detalhes, bem como demonstrações dos resultados mencionados nesta seção.

3.10 Digressão quanta-mecânica

Como comentado na Introdução deste trabalho, a Dinâmica Hamiltoniana desempenhou um papel importante na concepção e no desenvolvimento da Mecânica Quântica. Para abordar, de forma resumida, os vários pontos de contato entre estes dois ramos da Física, incluímos “digressões quanta-mecânicas” ao término de alguns capítulos. Como abordaremos apenas de forma superficial os assuntos a serem tratados, sugerimos ao leitor interessado num maior aprofundamento, que consulte textos especializados de Mecânica Quântica, dos quais há vários e excelentes exemplos.

Na Mecânica Clássica as quantidades físicas, como coordenadas e momenta generalizados, são representadas por quantidades escalares, vetoriais ou tensoriais. Já na Mecânica Quântica as observáveis físicas são operadores lineares e hermitianos (auto-adjuntos) que atuam sobre os vetores (“kets”) de estado que descrevem o sistema físico analisado [47]. Para distinguir uma quantidade clássica A do operador correspondente, este último pode ser representado por \hat{A} .

Na Mecânica Quântica, pode ocorrer que os operadores não comutem: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Definimos, então, o comutador

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad (3.232)$$

de modo que, se dois operadores comutam, então $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

A ideia de que dois operadores quaisquer podem não comutar remonta aos primeiros trabalhos de Heisenberg, Pauli e Jordan [57]. Born identificou, na sequência, essa propriedade de não-comutação com a álgebra matricial, o que conduziu a representação matricial de operadores [57]. Na mesma época Dirac observou que a relação entre quantidades clássicas e quânticas pode ser expressa empregando os colchetes de Poisson [28]:

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}], \quad (3.233)$$

onde $\hbar = h/2\pi$ é a constante de Planck reduzida.

A regra de Dirac (3.233) pode ser empregada para obter as relações de comutação fundamentais a partir dos colchetes de Poisson correspondentes (3.79)-(3.81):

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (3.234)$$

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0, \quad (3.235)$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad (3.236)$$

onde \hat{q}_i e \hat{p}_i representam os operadores de posição e momentum, respectivamente.

Na descrição de Heisenberg da Mecânica Quântica os operadores podem variar com o tempo, ao passo que os vetores (kets) de estado permanecem fixos [47]. Sob esta descrição podemos aplicar a regra de Dirac às equações de Hamilton na forma (3.83)-(3.84), substituindo as quantidades clássicas pelos operadores quânticos correspondentes

$$\frac{d\hat{q}_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{q}_i, \hat{H}], \quad (3.237)$$

$$\frac{d\hat{p}_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_i, \hat{H}], \quad (3.238)$$

que, por sua vez, são casos particulares da equação de Heisenberg, válida para um operador arbitrário (independente do tempo) [vide (3.86)],

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}], \quad (3.239)$$

onde \hat{H} é o operador Hamiltoniano.

Se as observáveis A e H são compatíveis, isto é, se o operador \hat{A} comuta com o Hamiltoniano ($[\hat{A}, \hat{H}] = 0$), então a equação de Heisenberg nos informa que $d\hat{A}/dt = 0$. Isto define uma constante quântica de movimento, de modo que

$$\hat{A}(t) = \hat{A}(t = 0). \quad (3.240)$$

Como um exemplo simples, o Hamiltoniano de uma partícula livre é obtido da Hamiltoniana clássica como

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2). \quad (3.241)$$

De (3.236) segue que todas as componentes do momentum comutam com H , e (3.238) indica que elas são constantes quânticas do movimento, ou seja

$$\hat{p}_i(t) = \hat{p}_i(t = 0), \quad (i = 1, 2, 3). \quad (3.242)$$

Usando (3.237) temos que as componentes do operador de posição satisfazem as relações

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = \frac{1}{m} \hat{p}_i(0), \quad (i = 1, 2, 3). \quad (3.243)$$

Resolvendo estas equações diferenciais, e usando a regra de Dirac (3.233) encontramos as seguintes relações de comutação para operadores dependentes do tempo.

$$[\hat{x}_i(0), \hat{x}_j(0)] = 0, \quad (3.244)$$

$$[\hat{x}_i(t), \hat{x}_i(0)] = -\frac{i\hbar t}{m}. \quad (3.245)$$

Um segundo exemplo é o de uma partícula de massa m sujeita a um potencial $V(\hat{\mathbf{r}})$, que é uma função do operador de posição. A Hamiltoniana correspondente é obtida acrescentando-se este potencial à expressão para a partícula livre (3.241)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\hat{\mathbf{r}}). \quad (3.246)$$

A evolução temporal da i -ésima componente do operador momentum é, de (3.238),

$$\frac{d\hat{p}_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_i, \hat{H}] = \frac{1}{2mi\hbar} [\hat{p}_i, \hat{\mathbf{p}}^2] + \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_i, V(\hat{\mathbf{r}})]. \quad (3.247)$$

Usando a identidade de comutadores

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}, [\hat{A}]\hat{C}, \quad (3.248)$$

obtemos

$$\begin{aligned} [\hat{p}_i, \hat{\mathbf{p}}^2] &= [\hat{p}_i, \sum_{j=1}^3 \hat{p}_j^2] = \sum_{j=1}^3 [\hat{p}_i, \hat{p}_j \hat{p}_j] \\ &= \sum_{j=1}^3 \left(\underbrace{[\hat{p}_i, \hat{p}_j]}_{=0} \hat{p}_j + \hat{p}_j \underbrace{[\hat{p}_i, \hat{p}_j]}_{=0} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.249)$$

de forma que [vide o problema XXX]

$$\frac{d\hat{p}_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_i, V(\hat{r})] = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(\hat{r}) \quad (3.250)$$

A evolução temporal das componentes do operador de posição é dada por (3.243)

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = \frac{1}{m} \hat{p}_i. \quad (3.251)$$

Aplicando novamente esta expressão obtemos a derivada segunda,

$$\frac{d^2\hat{x}_i}{dt^2} = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{d\hat{x}_i}{dt}, \hat{H} \right] = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{\hat{p}_i}{m}, \hat{H} \right] = -\frac{1}{m} \frac{\partial V(\hat{r})}{\partial x_i}. \quad (3.252)$$

Coletando as três componentes do operador de posição obtemos um análogo quanto-mecânico da equação Newtoniana do movimento

$$m \frac{d^2\hat{\mathbf{r}}}{dt^2} = -\nabla V(\hat{\mathbf{r}}). \quad (3.253)$$

A similaridade formal entre as equações clássicas e quânticas de movimento não pode nos iludir, uma vez que o significado físico delas é completamente diferente! Nas equações clássicas do movimento, as observáveis (como posições e momenta) podem ser medidas de forma irrestrita. Por outro lado, nas equações quânticas, devemos ter em mente que as medidas de uma certa observável são, na verdade, os autovalores dos operadores correspondentes.

A Mecânica Quântica, sendo intrinsecamente não-determinística, não nos permite saber, para uma dada medida, qual o autovalor que resulta da mesma, mas apenas o valor médio de um grande número de medidas, que é o valor esperado do operador. O desvio quadrático médio desta série de medidas é dado pela incerteza correspondente, calculada em termos dos valores esperados.

3.11 Problemas

1. (a) Mostre que são canônicas as seguintes transformações

$$\begin{aligned} Q(p, q) &= \ln(1 + \sqrt{q} \cos p), \\ P(p, q) &= 2(1 + \sqrt{q} \cos p) \sqrt{q} \sin p, \end{aligned}$$

verificando a invariância dos colchetes de Poisson fundamentais. (b) Mostre que a função geratriz de terceira espécie para essa transformação é

$$F_3(p, Q) = -(e^Q - 1)^2 \operatorname{tg} p.$$

2. Verificando a invariância dos colchetes de Poisson fundamentais, ache os valores dos parâmetros α e β para que as relações

$$\begin{aligned} Q(p, q) &= q^\alpha \cos(\beta p), \\ P(p, q) &= q^\alpha \sin(\beta p) \end{aligned}$$

representem uma transformação canônica. Ache a função geratriz de primeira espécie correspondente.

3. Um sistema com dois graus de liberdade é descrito pela Hamiltoniana

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = q_1 p_1 - q_2 p_2 - a q_1^2 + b q_2^2,$$

onde a e b são parâmetros. Mostre, usando colchetes de Poisson, que são constantes do movimento as seguintes quantidades

$$G_1 = \frac{1}{q_2} (p_1 - a q_1), \quad G_2 = q_1 q_2.$$

4. Num sistema com n graus de liberdade formamos o vetor $2n$ -dimensional

$$\mathbf{z} = (q_1, \dots, q_n; p_1, \dots, p_n)^T = (\mathbf{q}, \mathbf{p})^T.$$

(a) Mostre que as equações de Hamilton podem ser expressas na forma

$$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = \mathbf{Y} \cdot \nabla_{\mathbf{z}} H,$$

onde definimos a matriz simplética de ordem $2n$ ($\mathbf{0}$ e \mathbf{I} são, respectivamente, a matriz nula e a matriz identidade de ordem n)

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

e $\nabla_{\mathbf{z}} H$ é o gradiente em relação às componentes do vetor \mathbf{z} ;

(b) Considere a transformação de variáveis $\mathbf{z} \rightarrow \mathbf{Z}$, onde

$$\mathbf{Z} = (Q_1, \dots, Q_n; P_1, \dots, P_n)^T = (\mathbf{Q}, \mathbf{P})^T.$$

Mostre que a transformação é canônica se

$$\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{Y} \cdot \mathbf{J} = \mathbf{Y},$$

onde \mathbf{J} é a matriz Jacobiana da transformação, cujos elementos de matriz são

$$J_{ij} = \frac{\partial Z_i}{\partial z_j}, \quad (i, j = 1, 2, \dots, 2n).$$

5. Usando o método indicado no Problema 4, mostre que são canônicas as seguintes transformações:

(a)

$$\begin{aligned} Q(p, q) &= q \cos \alpha - p \sin \alpha, \\ P(p, q) &= q \sin \alpha + p \cos \alpha, \end{aligned}$$

e ache a função geratriz de primeira espécie correspondente.

(b)

$$\begin{aligned} Q(p, q) &= \ln \left(\frac{1}{q} \sin p \right), \\ P(p, q) &= q \cotg p, \end{aligned}$$

(c)

$$Q(p, q) = \operatorname{arctg} \left(\frac{\alpha q}{p} \right),$$

$$P(p, q) = \frac{\alpha q^2}{2} \left(1 + \frac{p^2}{\alpha^2 q^2} \right),$$

(d)

$$Q_1 = q_1,$$

$$Q_2 = p_2,$$

$$P_1 = p_1 - 2p_2,$$

$$P_2 = -2q_1 - q_2.$$

6. Considere uma Hamiltoniana independente do tempo \bar{H} de um sistema com n graus de liberdade. Mostre que, escolhendo qualquer uma das coordenadas generalizadas do sistema como um “tempo” fictício ζ , então o momentum canonicamente conjugado é uma Hamiltoniana H independente deste novo “tempo”, com $n - 1$ graus de liberdade. As equações de movimento para nova Hamiltoniana geram trajetórias num espaço de fase reduzido de dimensão $2(n - 1)$.
7. Considere o invariante integral relativo

$$J_1 = \oint_C \sum_{i=1}^n p_i dq_i,$$

onde C é uma curva fechada no espaço de fase, ao longo da qual o movimento é parametrizado pela variável ζ , de forma que $q_i = q_i(\zeta, t)$ e $p_i = p_i(\zeta, t)$. Mostre, por cálculo direto, que J_1 é uma constante do movimento e, portanto, um invariante canônico.