



PGF 5005 - Mecânica Clássica

Prof. Iberê L. Caldas

Quarto Estudo Dirigido

2º semestre de 2020

Os estudos dirigidos podem ser realizados em duplas.

Apenas os exercícios marcados com asteriscos precisam ser entregues para avaliação. As resoluções dos exercícios devem ser entregues ao monitor em um único arquivo pdf.

A resolução de cada exercício deve seguir a numeração indicada em seu enunciado.

Exercícios entregues em desacordo com estas regras serão desconsiderados na correção.

1. Integração numérica: Hamiltonianas não separáveis

1.1. Mapas implícitos

Em nosso primeiro estudo dirigido, consideramos apenas a integração numérica de sistemas dinâmicos decorrentes de Hamiltonianas separáveis. Ou seja, nosso interesse restringiu-se a Hamiltonianas com o seguinte formato:

$$H(q, p) = K(p) + U(q). \quad (1)$$

Entretanto, a separação de variáveis indicada acima não é factível em grande parte dos sistemas Hamiltonianos. No caso de Hamiltonianas não separáveis, as equações canônicas de movimento assumem a seguinte forma:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}(p, q), \quad (2a)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = \dot{p}(p, q), \quad (2b)$$

nas quais, de maneira geral, ambas as quantidades \dot{q} e \dot{p} possuem dependência funcional simultânea na posição e momento canônicos. Portanto, em um determinado instante de tempo, a variação temporal de uma variável dinâmica constitui uma função desta mesma variável. Esta característica resulta em complicações durante a aplicação de métodos simpléticos de integração numérica, uma vez que a evolução temporal do sistema é descrita por um *mapa implícito*.

Os mapas implícitos são definidos pela seguinte expressão:

$$\mu^{(n+1)} = f(\mu^{(n)}), \quad (3)$$

na qual introduzimos o vetor $\mu^{(n+1)} = (\mu_1^{(n+1)}, \mu_2^{(n+1)}, \dots, \mu_d^{(n+1)})$, cujos d elementos descrevem o estado do sistema dinâmico no instante de tempo $n + 1$. A quantidade $f = (f_1, f_2, \dots, f_d)$ representa uma função vetorial das variáveis $\mu^{(n+1)}$, a qual também pode apresentar dependência funcional explícita no estado do sistema para instantes de tempo anteriores a $n + 1$. De acordo com a identidade (3), podemos determinar a evolução temporal do sistema dinâmico mediante a resolução de um conjunto de equações algébricas para as variáveis $\mu^{(n+1)}$.

Considerando um sistema Hamiltoniano canônico com N graus de liberdade e Hamiltoniana não separável, o método de Euler simplético é descrito pelas seguintes equações:

$$q_j^{(n+1)} = q_j^{(n)} + \Delta t \left. \frac{\partial H}{\partial p_j} \right|_{(q^{(n+1)}, p^{(n)})}, \quad (4a)$$

$$p_j^{(n+1)} = p_j^{(n)} - \Delta t \left. \frac{\partial H}{\partial q_j} \right|_{(q^{(n+1)}, p^{(n)})}, \quad (4b)$$

nas quais $q^{(n)} = (q_1^{(n)}, q_2^{(n)}, \dots, q_N^{(n)})$, $p^{(n)} = (p_1^{(n)}, p_2^{(n)}, \dots, p_N^{(n)})$ e $j = 1, 2, \dots, N$. Como esperado, as identidades (4) geralmente correspondem a um mapa implícito, uma vez que a derivada parcial $\partial H / \partial p_j$,

quando calculada em $(q^{(n+1)}, p^{(n)})$, possui uma bastante provável dependência na variável $q_j^{(n+1)}$. Consequentemente, a determinação dos valores das posições canônicas $q^{(n+1)}$ está condicionada à resolução das equações (4a), as quais usualmente constituem um sistema algébrico não-linear. De maneira distinta, os valores dos momentos canônicos não estão determinados implicitamente, visto que podemos utilizar as identidades (4b) para o cálculo imediato do vetor $p^{(n+1)}$, após conhecido o valor de $q^{(n+1)}$.

1.2. Resolução numérica de mapas implícitos

Com o propósito de utilizar o método de Euler simplético para a integração numérica de um sistema dinâmico com Hamiltoniana não separável, precisamos estabelecer um procedimento para a resolução do sistema algébrico constituído pelas equações (4a) a cada passo de tempo. No presente estudo dirigido, realizamos uma breve apresentação do método de Newton, o qual representa uma ferramenta numérica bastante simples e poderosa para a busca de soluções em sistemas algébricos não-lineares.

Considere o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} g_1(q_1^{(n+1)}, q_2^{(n+1)}, \dots, q_N^{(n+1)}) &= 0, \\ g_2(q_1^{(n+1)}, q_2^{(n+1)}, \dots, q_N^{(n+1)}) &= 0, \\ &\vdots \\ g_N(q_1^{(n+1)}, q_2^{(n+1)}, \dots, q_N^{(n+1)}) &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

no qual as quantidades g_j representam funções das variáveis reais $q_j^{(n+1)}$, para $j = 1, 2, \dots, N$. Por exemplo, no caso do método de Euler simplético, uma comparação entre as expressões (4a) e (5) resulta no seguinte formato para as funções g_j :

$$g_j(q_1^{(n+1)}, q_2^{(n+1)}, \dots, q_N^{(n+1)}) = q_j^{(n+1)} - q_j^{(n)} - \Delta t \left. \frac{\partial H}{\partial p_j} \right|_{(q^{(n+1)}, p^{(n)})}. \quad (6)$$

De maneira a facilitar a exibição do método de Newton, podemos reescrever o sistema de equações (5) em notação vetorial:

$$g(q^{(n+1)}) = 0; \quad (7)$$

na qual introduzimos a função vetorial $g = (g_1, g_2, \dots, g_N)$. O método de Newton consiste basicamente em aproximar o conjunto de equações não-lineares (7) por um sistema algébrico linear. Para esta finalidade, realizamos uma aproximação por série de Taylor em primeira ordem:

$$g(q^{(n+1)}) \approx g(q^{(n+1,0)}) + J(q^{(n+1,0)})(q^{(n+1)} - q^{(n+1,0)}), \quad (8)$$

na qual o vetor $q^{(n+1,0)}$ simboliza uma aproximação inicial para a solução das equações (7). Observe que, durante a aplicação do método de Euler simplético, uma escolha interessante para a aproximação inicial seria $q^{(n+1,0)} = q^{(n)}$. A matriz J , também introduzida na expressão (8), representa o Jacobiano das funções g , o qual definimos pela seguinte relação:

$$J(q) = \left(\begin{array}{cccc} \frac{\partial g_1}{\partial q_1^{(n+1)}} & \frac{\partial g_1}{\partial q_2^{(n+1)}} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial q_N^{(n+1)}} \\ \frac{\partial g_2}{\partial q_1^{(n+1)}} & \frac{\partial g_2}{\partial q_2^{(n+1)}} & \dots & \frac{\partial g_2}{\partial q_N^{(n+1)}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_N}{\partial q_1^{(n+1)}} & \frac{\partial g_N}{\partial q_2^{(n+1)}} & \dots & \frac{\partial g_N}{\partial q_N^{(n+1)}} \end{array} \right) \bigg|_{q^{(n+1)}=q}. \quad (9)$$

Substituindo a aproximação (8) na equação (7), obtemos a definição para a primeira iteração do método de Newton:

$$J(q^{(n+1,0)})q^{(n+1,1)} = J(q^{(n+1,0)})q^{(n+1,0)} - g(q^{(n+1,0)}), \quad (10)$$

na qual o vetor $q^{(n+1,1)}$ corresponde à primeira solução resultante do algoritmo de Newton. Note que, para a obtenção da aproximação $q^{(n+1,1)}$, precisamos apenas resolver um sistema de equações lineares com matriz de coeficientes $J(q^{(n+1,0)})$ e vetor constante $J(q^{(n+1,0)})q^{(n+1,0)} - g(q^{(n+1,0)})$.

Com o objetivo de obter uma solução mais precisa, podemos empregar o resultado $q^{(n+1,1)}$ como a aproximação inicial em uma nova iteração do método de Newton. Evidentemente, podemos repetir este procedimento de retroalimentação diversas vezes, até que a precisão desejada seja alcançada. Portanto,

conhecida a solução aproximada $q^{(n+1,m)}$, podemos realizar uma subsequente iteração do método de Newton com a utilização da seguinte fórmula:

$$J(q^{(n+1,m)})q^{(n+1,m+1)} = J(q^{(n+1,m)})q^{(n+1,m)} - g(q^{(n+1,m)}). \quad (11)$$

Conforme mencionado anteriormente, devemos prosseguir com as iterações do método de Newton até que encontremos uma solução com a precisão pretendida. Como critério para a interrupção do processo iterativo, podemos empregar a seguinte relação:

$$|g(q^{(n+1,m+1)})| < \varepsilon, \quad (12)$$

na qual o parâmetro ε simboliza um número real positivo com valor próximo a zero. Ou seja, quando uma solução $q^{(n+1,m+1)}$ satisfaz a identidade (7) com suficiente precisão, consideramos que o sistema algébrico não-linear está numericamente resolvido. Desta forma, dentro da margem erro permitida pelo parâmetro ε , a seguinte igualdade torna-se válida:

$$q^{(n+1)} = q^{(n+1,m+1)}. \quad (13)$$

1.3. Resolução numérica de sistema lineares

Conforme evidenciado na subseção anterior, a aplicação do método de Newton está sujeita à resolução iterativa de sistemas algébricos lineares. Na presente subseção, realizamos uma sucinta revisão do algoritmo para a obtenção de soluções de sistemas lineares pelo método de *decomposição LU*.

Como primeiro passo, considere o seguinte sistema linear:

$$Aq = b, \quad (14)$$

no qual $q = (q_1, q_2, \dots, q_N)$ simboliza o vetor de variáveis e $b = (b_1, b_2, \dots, b_N)$ constitui um vetor constante. A quantidade A representa uma matriz invertível de ordem N , cujos coeficientes constantes são descritos pela seguinte notação:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

O método de fatoração *LU* consiste basicamente em reescrever a matriz A como um produto de duas matrizes triangulares, de acordo com a seguinte identidade:

$$A = LU. \quad (16)$$

Em termos de seus elementos, as matrizes L e U possuem a seguinte descrição:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{N1} & l_{N2} & l_{N2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1N} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2N} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{NN} \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Substituindo as expressões (15) e (17) na equação (16), podemos encontrar as relações entre os elementos das matrizes triangulares e os coeficientes da matriz A :

$$u_{jk} = a_{jk} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{jm}u_{mk}, \quad \text{para } j \leq k \text{ e } k = 1, 2, \dots, N, \quad (18a)$$

$$l_{jk} = \left(a_{jk} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{jm}u_{mk} \right) / u_{kk}, \quad \text{para } N \geq j > k \text{ e } k = 1, 2, \dots, N-1. \quad (18b)$$

Utilizando as identidades anteriores, podemos prontamente calcular as matrizes L e U em função dos valores conhecidos dos coeficientes a_{jk} . Então, como próximo passo em nosso algoritmo numérico, realizamos a decomposição do equação (14) em dois sistemas lineares auxiliares:

$$Lx = b, \quad (19a)$$

$$Uq = x, \quad (19b)$$

nos quais introduzimos o vetor $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$. Observe que a resolução sequencial dos sistemas lineares (19a) e (19b) é completamente equivalente à resolução da identidade (14).

A solução da equação (19a) decorre da seguinte fórmula:

$$x_j = b_j - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} x_k, \text{ para } j = 1, 2, \dots, N. \quad (20)$$

Uma vez conhecido o valor do vetor x , podemos resolver o sistema linear (19b) com utilização da seguinte identidade:

$$q_j = \left(x_j - \sum_{k=j+1}^N u_{jk} q_k \right) / u_{jj}, \text{ para } j = 1, 2, \dots, N. \quad (21)$$

Com a determinação do vetor q , obtemos finalmente a solução de nosso problema original, representado pela equação (14).

2. Aplicação: Hamiltoniana de Walker-Ford

Nesta seção, com o auxílio dos métodos numéricos discutidos anteriormente, realizaremos o estudo da Hamiltoniana de Walker-Ford (referência **3.1**), cujo propósito é ilustrar o aparecimento de regiões caóticas no espaço de fase como consequência da interação de ressonâncias não-lineares e a destruição de toros KAM. Podemos descrever a Hamiltoniana de Walker-Ford como a soma entre um termo integrável H_0 e uma perturbação H_1 :

$$H = H_0 + H_1, \quad (22a)$$

$$H_0 = J_1 + J_2 - J_1^2 - 3J_1J_2 + J_2^2, \quad (22b)$$

$$H_1 = \alpha J_1 J_2 \cos(2\phi_1 - 2\phi_2) + \beta J_1 J_2^{\frac{3}{2}} \cos(2\phi_1 - 3\phi_2). \quad (22c)$$

Observe que a perturbação H_1 é constituída por dois termos ressonantes, cujas intensidades são controladas pelos parâmetros α e β . As quantidades ϕ_k e J_k , para $k = 1, 2$, denotam respectivamente as variáveis canônicas de ângulo e ação para a Hamiltoniana não perturbada.

2.1 Demonstre que a Hamiltoniana H é uma constante de movimento para quaisquer valores dos parâmetros α e β . Em seguida, mostre que as funções $F_1 = J_1 + J_2$, para $\beta = 0$, e $F_2 = 3J_1 + 2J_2$, para $\alpha = 0$, também representam constantes de movimento. Note que, como consequência dos resultados anteriores, determinamos que a Hamiltoniana de Walker-Ford é integrável nos casos em que os parâmetros α ou β são nulos.

2.2 Considerando a Hamiltoniana (22a), escreva as equações para $\phi_k^{(n+1)}$ e $J_k^{(n+1)}$ de acordo com o método de Euler simplético.

***2.3** Realize a implementação computacional das equações obtidas nos exercício anterior. Em seu programa, de maneira complementar ao método de Euler simplético, realize também a implementação do método de Newton, uma vez que a resolução de sistemas algébricos não-lineares será necessária para a integração das equações de movimento. Conforme mencionado anteriormente, a utilização do método de Newton está condicionada à resolução iterativa de sistemas algébricos lineares. Portanto, a implementação em seu programa do algoritmo de decomposição LU para a resolução numérica de sistemas lineares também é necessária. Em breve, os resultados do presente exercício serão utilizados para a construção de seções de Poincaré. Desta maneira, o algoritmo de Hénon para a determinação de seções de Poincaré também deve ser implementado em seu programa. Anexe o código do programa desenvolvido ao seu trabalho.

***2.4** Considere a seguinte transformação de variáveis:

$$q_k = \sqrt{2J_k} \cos \phi_k, \quad (23a)$$

$$p_k = -\sqrt{2J_k} \sin \phi_k, \quad (23b)$$

na qual as quantidades q_k e p_k , para $k = 1, 2$, representam respectivamente variáveis canônicas de posição e momento.

Construa uma seção de Poincaré no plano $p_2 \times q_2$ para $q_1 = 0$, $p_1 \geq 0$, $\alpha = 0, 1$, $\beta = 0$ e energia total $E = 0, 18$. Observe que as condições $q_1 = 0$ e $p_1 \geq 0$ equivalem à identidade $\phi_1 = 3\pi/2$. Indique os pontos fixos elípticos e hiperbólicos em seu gráfico. Anexe a figura obtida ao seu trabalho. Note que o gráfico elaborado no presente exercício é semelhante à figura 6 do artigo de Walker e Ford.

- *2.5 Escolha uma trajetória utilizada para a construção da seção de Poincaré no exercício anterior e elabore gráficos para as funções H , F_1 e F_2 em função do tempo. Anexe a figura obtida ao seu trabalho. Comente os resultados.
- *2.6 Obtenha a seção de Poincaré no plano $p_2 \times q_2$ para $q_1 = 0$, $p_1 \geq 0$, $\alpha = 0$, $\beta = 0,1$ e $E = 0,18$. Indique os pontos fixos elípticos e hiperbólicos em seu gráfico. Anexe a figura obtida ao seu trabalho. O gráfico elaborado neste exercício é análogo à figura 7 do artigo de Walker e Ford.
- *2.7 Escolha uma trajetória utilizada para a construção da seção de Poincaré no exercício anterior e elabore gráficos para as funções H , F_1 e F_2 em função do tempo. Anexe a figura obtida ao seu trabalho. Comente os resultados.
- *2.8 Construa uma seção de Poincaré no plano $p_2 \times q_2$ para $q_1 = 0$, $p_1 \geq 0$, $\alpha = \beta = 0,02$ e $E = 0,0561$. Anexe a figura obtida ao seu trabalho. Indique os termos da perturbação H_1 que produzem ressonâncias visíveis nesta seção Poincaré. Identifique estas ressonâncias em sua figura. O gráfico elaborado neste exercício corresponde à figura 8 do artigo de Walker e Ford.
- *2.9 Obtenha a seção de Poincaré no plano $p_2 \times q_2$ para $q_1 = 0$, $p_1 \geq 0$, $\alpha = \beta = 0,02$ e $E = 0,18$. Anexe a figura obtida ao seu trabalho. Indique os termos da perturbação H_1 que produzem ressonâncias visíveis nesta seção Poincaré. Identifique estas ressonâncias em sua figura. O gráfico elaborado neste exercício corresponde à figura 9 do artigo de Walker e Ford.
- *2.10 Elabore uma seção de Poincaré no plano $p_2 \times q_2$ para $q_1 = 0$, $p_1 \geq 0$, $\alpha = \beta = 0,02$ e $E = 0,20$. Anexe a figura obtida ao seu trabalho. Indique em sua figura as ressonâncias secundárias visíveis. O gráfico obtido neste exercício corresponde à figura 12 do artigo de Walker e Ford.
- *2.11 Construa uma seção de Poincaré no plano $p_2 \times q_2$ para $q_1 = 0$, $p_1 \geq 0$, $\alpha = \beta = 0,02$ e $E = 0,2095$. Anexe a figura obtida ao seu trabalho. O gráfico obtido neste exercício corresponde à figura 11 do artigo de Walker e Ford.

3. Referências

- 3.1 G. H. Walker and J. Ford, “Amplitude Instability and Ergodic Behavior for Conservative Nonlinear Oscillator Systems”, *Physical Review* **188**, 416-432 (1969).