PGF 5005 - Mecânica Clássica

Prof. Iberê L. Caldas

Segundo Estudo Dirigido

2º semestre de 2025

Atenção!

- Os estudos dirigidos **podem** ser realizados em **duplas**.
- Apenas os exercícios marcados com **asteriscos** precisam ser **entregues** para avaliação.
- A **resolução** de cada exercício deve **seguir a numeração** indicada em seu enunciado.
- As **resoluções** dos exercícios devem ser **entregues** ao monitor em um **único** arquivo **PDF**.

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:

$$H(q,p) = K(p) + U(q). \tag{1}$$

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:

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

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

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:

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

na qual introduzimos o vetor $\mu^{(n+1)} = (\mu_1^{(n+1)}, \mu_2^{(n+1)}, \ldots, \mu_d^{(n+1)})$, cujos d elementos descrevem o estado do sistema dinâmico no instante de tempo $n+1$. A quantidade $f = (f_1, f_2, \ldots, f_d)$ 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:

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

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

nas quais $q^{(n)} = (q_1^{(n)}, q_2^{(n)}, \ldots, q_N^{(n)})$, $p^{(n)} = (p_1^{(n)}, p_2^{(n)}, \ldots, p_N^{(n)})$ e $j = 1, 2, \ldots, N$. 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:

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

no qual as quantidades g_j representam funções das variáveis reais $q_j^{(n+1)}$, para $j = 1, 2, \ldots, N$. 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:

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

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

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

na qual introduzimos a função vetorial $g = (g_1, g_2, \ldots, g_N)$. 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:

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

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:

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

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

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

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:

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

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:

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

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:

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

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:

$$Aq = b, \tag{14}$$

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

são descritos pela seguinte notação:

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

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:

$$A = LU. \tag{16}$$

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

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

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

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

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

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:

$$Lx = b, \tag{19a}$$

$$Uq = x, \tag{19b}$$

nos quais introduzimos o vetor $x = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$. 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:

$$x_j = b_j - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} x_k, \text{ para } j = 1, 2, \ldots, N. \tag{20}$$

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

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

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:

$$H = H_0 + H_1, \tag{22a}$$

$$H_0 = J_1 + J_2 - J_1^2 - 3J_1J_2 + J_2^2, \tag{22b}$$

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

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:

$$q_k = \sqrt{2J_k}\cos\phi_k, \tag{23a}$$

$$p_k = -\sqrt{2J_k}\sin\phi_k, \tag{23b}$$

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).