

Capítulo 5

Sistemas hamiltonianos

É importante distinguir as equações cujo fluxo de fase conserva o volume de qualquer subconjunto compacto do espaço de fases. Quando o campo de vectores X tem divergência nula ($\operatorname{div}X = 0$), a equação diferencial diz-se conservativa (teorema de Liouville), pois o volume de fase não se altera durante a evolução temporal no espaço de fases. Caso contrário, o sistema é dissipativo. Em geral, tem-se:

Teorema 5.1 (Liouville). *O fluxo de fase de uma equação diferencial deixa invariante o volume de fase $\int_V \rho(x)dx$, se*

$$\frac{\partial \rho(x(t))}{\partial t} + \operatorname{div} \rho(x)X = 0,$$

em que $\rho(x)$ é a densidade de medida, X é o campo de vectores e V é um subconjunto compacto do espaço de fases. No caso particular da medida de Lebesgue, ρ é uma constante, tem-se a condição $\operatorname{div}X = 0$.

Uma equação às diferenças é conservativa se o determinante da matriz Jacobiana da equação às diferenças é constante e tem o valor 1.

Os sistemas hamiltonianos são um caso particular de sistemas conservativos. Seja o sistema hamiltoniano

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial y} \\ \dot{y} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \end{cases} \quad (5.1)$$

em que $x, y \in \mathbb{R}$ e $H(x, y)$ é o hamiltoniano ou função energia. Supondo que H é de classe C^2 , tem-se que

$$\operatorname{div}X = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial H}{\partial x} = 0.$$

Assim, o volume de fase dos sistemas hamiltonianos é invariante para o fluxo no espaço de fase.

Seja (x^*, y^*) um ponto fixo do campo de vectores hamiltoniano e suponha-se que numa vizinhança de (x^*, y^*) o hamiltoniano tem um mínimo não degenerado. Nestas condições, a função $V = H(x, y) - H(x^*, y^*)$ é uma função de Lyapunov na vizinhança de (x^*, y^*) . Como H não depende explicitamente do tempo, por (5.1),

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial H}{\partial y} \dot{y} = 0 \quad (5.2)$$

e está-se nas condições de estabilidade simples do teorema de Lyapunov 2.2. Se a função de Hamilton tem um máximo local não-degenerado em (x^*, y^*) , pode-se escolher $V = H(x^*, y^*) - H(x, y)$ como função de Lyapunov e está-se ainda nas condições do teorema de Lyapunov. Assim, tem-se:

Teorema 5.2. *Seja um sistema Hamiltoniano com função de Hamilton $H(x, y)$, independente do tempo, com um ponto fixo não degenerado de coordenadas (x^*, y^*) . Se $H(x, y)$ tem um mínimo ou um máximo local na vizinhança de (x^*, y^*) , então (x^*, y^*) é estável à Lyapunov.*

Da (5.2) resulta ainda que qualquer solução de uma equação diferencial hamiltoniana está sobre a curva de nível do hamiltoniano definido pela condição $H(x, y) = H(x_0, y_0)$, em que (x_0, y_0) é uma condição inicial no espaço de fases. Esta propriedade permite, pelo menos em dimensão 2, determinar as curvas de fase.

5.1 Geometria de um oscilador harmónico

Analise-se em mais detalhe a dinâmica de um oscilador harmónico. A função de Hamilton de um oscilador harmónico é

$$H = \frac{1}{2}(y^2 + \omega^2 x^2).$$

A equação do movimento é o sistema de duas equações diferenciais lineares

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial y} = y \\ \dot{y} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\omega^2 x. \end{cases} \quad (5.3)$$

Qualquer curva de fase está sobre um círculo S^1 , mergulhado em \mathbb{R}^2 . Ora, veja-se. Seja a transformação de variáveis canónicas (transformação que preserva as áreas e a orientação)

$$\begin{cases} x = \sqrt{\frac{2I}{\omega}} \cos \theta \\ y = 2\sqrt{\frac{I\omega}{2}} \sin \theta \end{cases} \implies \begin{cases} I = \frac{\omega}{2}(x^2 + \frac{1}{\omega^2}y^2) \\ \theta = \arctg \frac{y}{x\omega} \end{cases} \quad (5.4)$$

Como se verifica facilmente, $\frac{\partial(x,y)}{\partial(I,\theta)} = 1$. Nas novas coordenadas (5.4), o sistema de equações (5.3) reduz-se a

$$\begin{cases} \dot{I} = 0 \\ \dot{\theta} = -\omega \pmod{2\pi} \end{cases} \quad (5.5)$$

Como as soluções da equação diferencial (5.5) são $I(t) = C^{te}$ e $\theta(t) = \theta_0 - \omega t \pmod{2\pi}$, e como o conjunto $(0, 2\pi)$ é uma carta do círculo S^1 , o sistema

$$\dot{\theta} = -\omega \pmod{2\pi} \quad (5.6)$$

define uma equação diferencial nas coordenadas da carta do círculo S^1 .

Nas coordenadas (x, y) e (I, θ) as soluções do sistema hamiltoniano $H = \frac{1}{2}(y^2 + \omega^2 x^2)$ têm a forma qualitativa indicada na figura 5.1.

Suponha-se que em intervalos de tempo $\Delta t = 1$, se observa a evolução temporal da coordenada de posição do oscilador harmónico. A coordenada observada vai tomar os valores $x(0), x(1), x(2)$ ou, em coordenadas angulares,

$$\begin{aligned} \theta(0) &= \theta_0 \pmod{2\pi} \\ \theta(1) &= \theta_0 - \omega \pmod{2\pi} \\ \theta(2) &= \theta_1 - \omega = \theta_0 - 2\omega \pmod{2\pi} \\ &\vdots \\ \theta_{n+1} &= \theta_0 - n\omega \pmod{2\pi} \end{aligned}$$

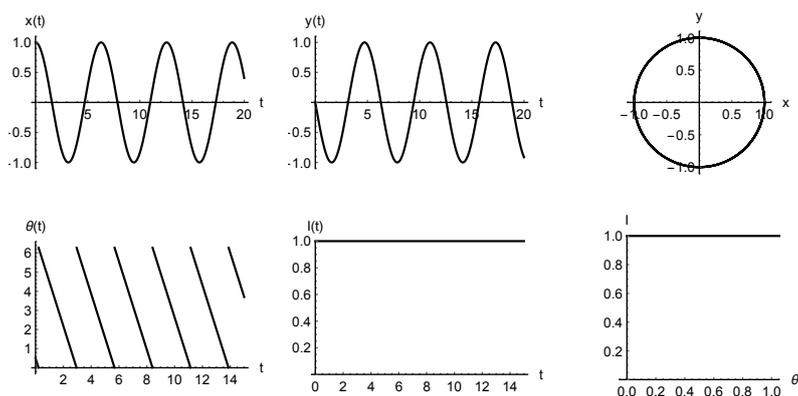


Figura 5.1: Coordenadas cartesianas (x, y) , coordenadas de ação-ângulo (I, θ) e espaço de fases de um oscilador harmónico.

pois $\theta(t) = \theta_0 - \omega t \pmod{2\pi}$.

Como o tempo de observação é discreto, a transformação $\theta_{n+1} = \theta_n - \omega \pmod{2\pi}$ é um difeomorfismo do círculo, cujo gráfico está representado na figura 5.2. A transformação $R_\omega(\theta) := \theta - \omega$ designa-se por rotação pura de ângulo $-\omega$.

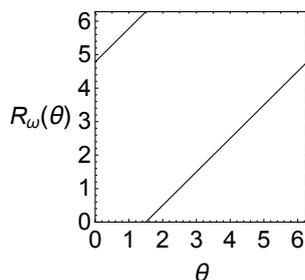


Figura 5.2: Gráfico do difeomorfismo do círculo $R_\omega(\theta)$ associado ao movimento do oscilador harmónico, para $\omega = 1.5$. Este difeomorfismo é designado por rotação pura de ângulo $-\omega$.

Seja então o difeomorfismo do círculo associado à evolução do oscilador harmónico,

$$\theta_{n+1} = f(\theta_n) = \theta_n - \omega \pmod{2\pi}$$

e analise-se o comportamento das iteradas de um ponto genérico $\theta_0 \in (0, 2\pi)$,

com $\omega \in (0, 2\pi)$.

Definição 5.3. Um número $\omega \in \mathbb{R}$ é comensurável com 2π se existirem inteiros n e m tais que $n\omega + m2\pi = 0$ isto é, $\omega = -2\pi m/n$. Caso contrário ω é incomensurável com 2π .

Lema 5.4 (Jacobi, [Arnold et al., 1968]). *Seja $\theta_{n+1} = \theta_n - \omega \pmod{2\pi}$ uma aplicação do círculo S^1 . Se ω é comensurável com 2π , $\omega = 2\pi p/q$, qualquer ponto $\theta \in S^1$ é periódico de período q , em que p e q são números inteiros positivos. Se ω é incomensurável com 2π , a órbita de um ponto qualquer $\theta \in S^1$ é densa em S^1 .*

Demonstração. Suponha-se que ω é comensurável com 2π , $\omega = 2\pi p/q$. Na representação complexa, a rotação pura é o sistema dinâmico $z_{n+1} = \psi(z_n)$, em que $\psi(z) = e^{-i\omega}z$, com $z \in S^1$. Então $\psi^q(z) = e^{-i\frac{p}{q}q2\pi}z = e^{-i2\pi p}z = z$ e portanto, z tem período q .

Se ω é incomensurável com 2π , a órbita de z tem um número infinito de pontos. Caso contrário, existem inteiros positivos r e s tais que

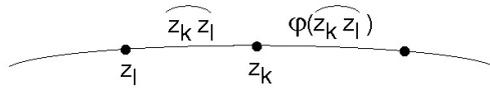
$$\begin{aligned} \psi^r(z) = \psi^s(z) &\Rightarrow e^{-i\omega r}z = e^{-i\omega s}z \Rightarrow e^{-i\omega(r-s)}z = 1 \\ &\Rightarrow \omega(r-s) = 2\pi n \Rightarrow \omega = 2\pi \frac{n}{r-s} \end{aligned}$$

o que contradiz a hipótese de não comensurabilidade com 2π . Assim, a órbita de z é infinita, isto é, $\#\mathcal{O}(z) = \#\{z, z_1, \dots\} = \infty$.

Seja (a, b) um conjunto aberto no círculo com $|(a, b)| = \varepsilon$. Como $\{z_n\} = \{\psi^n(z)\}$ é uma sucessão num conjunto compacto, existem k e l , com $k > l$, tais que, $|z_k - z_l| < \varepsilon$.¹ Seja a função

$$\phi(z) = e^{-i(k-l)\omega}z.$$

Então $\phi(z_l) = e^{-i(k-l)\omega}z_l = e^{-ik\omega}z_0 = z_k$ e ϕ aplica o arco $\widehat{z_l z_k}$ num arco consecutivo:



¹Seja $\{x_n\}$ uma sucessão num espaço compacto X . A sucessão $\{x_n\}$ tem um *ponto limite* x , se qualquer vizinhança $\mathcal{V}(x)$ contém um número infinito de elementos de $\{x_n\}$. **Teorema:** X é compacto se, e somente se, qualquer sucessão $\{x_n\}$ tem um ponto limite (cluster point).

Como ϕ corresponde a uma rotação pura, o comprimento dos arcos são iguais. Como o comprimento do círculo S^1 é finito, $|z_k - z_l| < \varepsilon$ e $|(a, b)| = \varepsilon$, existe um N tal que $\phi^N(z_l) \in (a, b)$. Como ε é arbitrário, está assim demonstrada a densidade de $\mathcal{O}(z_0)$. \square

Do lema de Jacobi resulta que as órbitas de um oscilador harmónico podem ser aperiódicas.

O que foi exposto até aqui tem um significado simples: Suponha-se que se fazem observações do ângulo de rotação de um oscilador harmónico ou de um sistema de osciladores não acoplados, ao fim dos tempos $t = 0, 1, 2, \dots$. Nestas condições, obtém-se a *série temporal*

$$\mathcal{O}(\theta) = \{\theta_0, \theta_1, \theta_2, \dots\}.$$

Como o ângulo de rotações ω é genericamente incomensurável com 2π , a órbita de θ — $\mathcal{O}(\theta)$, é densa no intervalo $[0, 2\pi]$.

Na demonstração, tem um papel importante o facto da transformação $\theta_{n+1} = \theta_n - \omega$ preservar os comprimentos dos intervalos. O histograma de frequências dos pontos θ_n , $n = 1, 2, \dots$, no intervalo $[0, 2\pi)$, é a densidade da medida de Lebesgue que é a função constante $\rho(\theta) = 1$.

As aplicações do círculo não aparecem exclusivamente em sistemas de osciladores harmónicos, aparecem também associadas aos pontos fixos estáveis (centros) dos sistemas hamiltonianos bidimensionais não lineares.

Exemplo 5.5. Seja o hamiltoniano $H = \frac{1}{2}y^2 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{3}x^3$. O sistema de equações diferenciais é

$$\begin{cases} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial y} = y \\ \dot{y} &= -\frac{\partial H}{\partial x} = -x + x^2. \end{cases} \quad (5.7)$$

Este sistema de equações tem dois pontos fixos, um do tipo centro e outro do tipo sela (figura 5.3). O ponto fixo do tipo centro — $(0, 0)$ — é estável à Lyapunov, pois $H(x, y)$ é uma função de Lyapunov na vizinhança da origem. As órbitas de fase são as curvas de nível da função H . Com $H(x, y) : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, para cada valor da energia $H = h$, as órbitas de fase são as imagens de $H^{-1}(h)$.

As curvas de fase têm a equação

$$\frac{1}{2}y^2 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{3}x^3 = h = C^{te}.$$

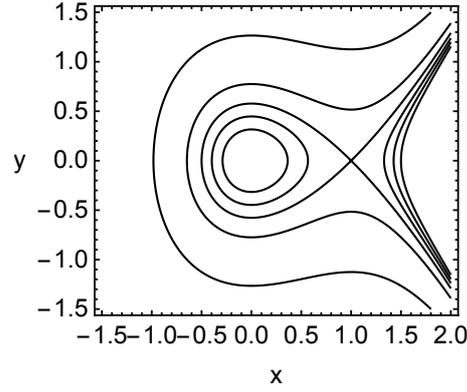


Figura 5.3: Órbitas de fase do sistema de equações (5.7).

Para h pequeno, as curvas de fase são variedades compactas imersas em \mathbb{R}^2 e o fluxo pode ser parametrizado por um ângulo de rotação θ . Pelo teorema de existência e unicidade, o fluxo sobre as curvas de energia constante induz um homeomorfismo (difeomorfismo) no tempo 1 sobre o círculo. Neste caso, não se tem necessariamente uma rotação pura ($\theta_{n+1} = \theta_n - \omega$), mas sim um homeomorfismo do círculo. ■

No caso de dois osciladores harmónicos desacoplados, de frequências ω_1 e ω_2 , a função de Hamilton é

$$H = \frac{1}{2}(y^2 + \omega_1^2 x^2) + \frac{1}{2}(w^2 + \omega_2^2 z^2) = H_1 + H_2. \quad (5.8)$$

Introduzindo variáveis canónicas de acção-ângulo $(I_1, \theta_1, I_2, \theta_2)$, como em (5.4), chega-se à conclusão que as curvas de fase estão sobre superfícies tóricas $T^2 = S^1 \times S^1$. Estas superfícies são toros T^2 de dimensão 2 mergulhado em \mathbb{R}^4 . Assim, as equações diferenciais que descrevem o movimento dos dois osciladores desacoplados são

$$\begin{cases} \dot{\theta}_1 &= -\omega_1 \pmod{2\pi} \\ \dot{\theta}_2 &= -\omega_2 \pmod{2\pi}. \end{cases} \quad (5.9)$$

O toro T^2 tem uma visualização geométrica simples. As coordenadas I_1 e I_2 são proporcionais aos raios de dois círculos e, θ_1 e θ_2 são as respectivas coordenadas angulares (figura 5.4).

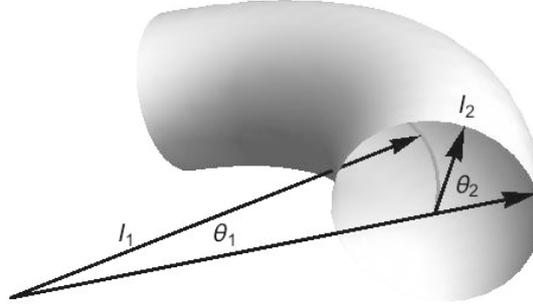


Figura 5.4: Coordenadas angulares e de ação da folheação de \mathbb{R}^4 induzida pelas órbitas do sistema hamiltoniano (5.8).

Os sistemas de dois osciladores harmônicos não acoplados podem ser analisados do mesmo modo que o que foi feito até aqui. Por (5.9), o mapa do toro, em intervalos de tempo $\Delta t = 1$, é

$$\begin{cases} \theta_1^{n+1} &= \theta_1^n - \omega_1 \pmod{2\pi}. \\ \theta_2^{n+1} &= \theta_2^n - \omega_2 \pmod{2\pi}. \end{cases} \quad (5.10)$$

Assim, (5.10) define um difeomorfismo do toro T^2 .

Com a ajuda do lema de Jacobi 5.4, conclui-se que as órbitas do sistema de equações derivado do Hamiltoniano (5.8) são hélices sobre as foliações tóricas do espaço de fases \mathbb{R}^4 . Em coordenadas angulares, as curvas integrais no espaço de fases têm a forma representada na figura 5.5.

Para que a curva integral seja densa no toro T^2 , as suas intersecções ao longo das linhas $\theta_1 = 0, 2\pi, 4\pi, \dots$ e $\theta_2 = 0, 2\pi, 4\pi, \dots$ têm que ser densas. Como

$$\begin{cases} \theta_1(t) &= \theta_{10} - \omega_1 t \\ \theta_2(t) &= \theta_{20} - \omega_2 t \end{cases} \implies \theta_2(t) = \theta_{20} + \frac{\omega_2}{\omega_1}(\theta_1(t) - \theta_{10}),$$

tem-se que, para $\theta_{10} = 0$ e $\theta_1(t) = 2\pi, 4\pi, \dots$, o tempo discreto é $t_n = -2\pi n / \omega_1$,

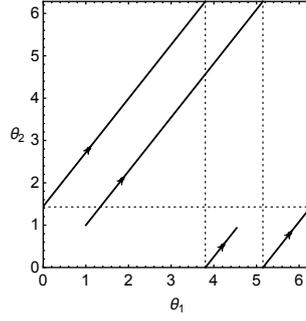


Figura 5.5: Trajectórias de fase do sistema de equações diferenciais (5.9), para $\omega_1 = -1$ e $\omega_2 = -\pi/4$ e $0 \leq t \leq 12.5$. As condições iniciais são $\theta_1^0 = \theta_2^0 = 1$. Quando $t \rightarrow \infty$, a trajectória de fase percorre densamente o toro T^2 . Estas curvas de fase são hélices tóricas em \mathbb{R}^4 .

e

$$\theta_2\left(-\frac{2\pi n}{\omega_1}\right) = \theta_{20} + \frac{\omega_2}{\omega_1}(2\pi n) \implies \theta_n = \theta_0 + \frac{\omega_2}{\omega_1}2\pi n \implies \theta_n = \theta_{n-1} + \frac{\omega_2}{\omega_1}2\pi.$$

Pelo lema de Jacobi 5.4, se $2\pi\omega_2/\omega_1$ é irracional, as intersecções com as rectas $\theta_1 = 0, 2\pi, 4\pi, \dots$ formam um conjunto denso no intervalo $[0, 2\pi]$.

De igual modo, tem-se que

$$\theta_1(t) = \theta_{10} + \frac{\omega_1}{\omega_2}(\theta_2(t) - \theta_{20}),$$

e o resultado é análogo.

Em geral, o espaço de fases \mathbb{R}^{2n} de um sistema de n osciladores harmónicos não acoplados é folheado por toros de dimensão n — T^n , cuja carta é o conjunto

$$\underbrace{(0, 2\pi) \times \dots \times (0, 2\pi)}_{n \text{ vezes}}.$$

Isto é, as órbitas no espaço de fases estão sobre toros T^n .

Muitas vezes é mais simples trabalhar num sistema de coordenadas em que a carta da circunferência é o intervalo $(0, 1)$. Nestes casos, usam-se as seguintes transformações de S^1 : $\theta_{n+1} = \theta_n - \omega \pmod{1}$, com $\omega \in (0, 1)$ e a comensurabilidade e incomensurabilidade com 2π é substituída, respectivamente, pela racionalidade e irracionalidade de ω .

Quere-se saber de que maneira é possível transpor os resultados do oscilador harmónico para sistemas de osciladores não-lineares. Foram obtidos alguns resultados nesta direcção por Denjoy em 1932.

5.2 Teoria de Denjoy

Considerem-se homeomorfismos (difeomorfismos) do círculo $f : S^1 \rightarrow S^1$ que preservam a orientação, isto é, se x, y e z são pontos do círculo com $x < y < z$, então $f(x) < f(y) < f(z)$. Note-se que a relação “ $<$ ” é uma ordem cíclica. Isto implica que o gráfico de f na carta do círculo é monótona crescente.

Para fixar a notação, vamos considerar as *rotações puras* de ângulo ω na forma

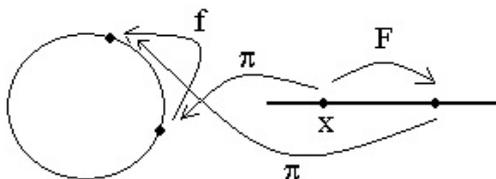
$$R_\omega(\theta) = \theta + \omega \pmod{2\pi}.$$

Seja $\pi : \mathbb{R} \rightarrow S^1$ uma aplicação da reta real no círculo, por exemplo,

$$\pi(x) = \cos x + i \sin x = e^{ix}.$$

Definição 5.6. Uma aplicação $F(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma *suspensão* da aplicação $f : S^1 \rightarrow S^1$, se

$$\pi \circ F = f \circ \pi.$$



É claro que π não é uma equivalência topológica (transformação de variáveis) pois π não é invertível. No caso das rotações puras, tem-se

$$\begin{array}{ll} R_\omega(\theta) = \theta + \omega \pmod{2\pi} & \text{mapa na carta de } S^1 \\ F(\theta) = \theta + \omega, & \text{suspensão} \end{array}$$

pois, como se verifica facilmente,

$$\begin{aligned} \pi \circ F &= \pi \circ (\theta + \omega) = e^{i\theta} e^{i\omega} \\ f \circ \pi &= f \circ e^{i\theta} = e^{i\omega} e^{i\theta}. \end{aligned}$$

Uma função $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma suspensão de um homeomorfismo do círculo se é monótona crescente e

$$F(x + 2\pi) = F(x) + 2\pi \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

De facto existem várias suspensões para uma aplicação de S^1 . No caso das rotações puras de ângulo ω , $F(x) = \theta + \omega + 2\pi k$ é uma família de suspensões quando k percorre os inteiros.

Propriedades das suspensões:

a) Se $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma suspensão de $f : S^1 \rightarrow S^1$ então, F^n é uma suspensão de f^n e

$$F^n(x + 2\pi k) = F^n(x) + 2\pi k.$$

De facto,

$$\pi \circ F = f \circ \pi \Rightarrow \pi \circ F^2 = f \circ \pi \circ F = f^2 \circ \pi$$

e

$$F^2(x + 2\pi k) = F(F(x + 2\pi k)) = F(F(x) + 2\pi k) = F^2(x) + 2\pi k.$$

b) A função $F(x) - x$ é periódica de período 2π .

Ora,

$$\begin{aligned} F(x + 2\pi k) &= F(x) + 2\pi k \Rightarrow \\ F(x + 2\pi k) - (x + 2\pi k) &= F(x) + 2\pi k - (x + 2\pi k) = F(x) - x. \end{aligned}$$

c) $|F^n(x) - x| \leq M$.

Como $F^n(x) - x$ é periódica de período 2π e contínua, $F^n(x) - x$ toma o seu valor máximo no intervalo $[0, 2\pi]$.

Veja-se que existe um número que desempenha o papel de um ângulo de rotações para os homeomorfismos e difeomorfismos do círculo.

Proposição 5.7. *Seja $f : S^1 \rightarrow S^1$ um homeomorfismo do círculo que preserva a orientação e seja $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma suspensão. Então o número*

$$\rho_0(F) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|F^n(x)|}{n}$$

existe e não depende da escolha do ponto $x \in \mathbb{R}$.

O número construído na proposição anterior depende da suspensão. Seja a rotação pura $R_\omega(\theta) = \theta + \omega \pmod{2\pi}$ e seja a suspensão $T(x) = x + \omega + 2\pi k$. Como, $T^2(x) = x + 2\omega + 4\pi k$, vem que, $T^n(x) = x + n\omega + 2\pi nk$, e,

$$\rho_0(F) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|T^n(x)|}{n} = \omega + 2\pi k.$$

Como $\rho_0(F)$ depende da suspensão apenas por múltiplos de 2π , tem-se:

Definição 5.8. Seja $f : S^1 \rightarrow S^1$ um homeomorfismo do círculo e $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma suspensão. O número de rotações de f é definido como

$$\rho(f) = \rho_0(F) \pmod{2\pi}$$

Assim, o número de rotações $\rho(f)$ está bem definido e não depende da suspensão F . De facto, duas suspensões de uma aplicação do círculo diferem apenas por um múltiplo de 2π . Se F_1 e F_2 são suspensões, tem-se que, de $\pi \circ F = f \circ \pi$,

$$\begin{aligned} \cos F_1(x) + i \sin F_1(x) &= \cos F_2(x) + i \sin F_2(x) \Rightarrow \\ F_2(x) &= F_1(x) + 2\pi k. \end{aligned}$$

No que se segue, mostra-se que $\rho(f)$ é o análogo do ângulo de rotação ω das rotações puras. Isto é, sob certas condições, se $f : S^1 \rightarrow S^1$ é um difeomorfismo do círculo, então f é topologicamente equivalente a uma rotação pura.

Vejamos primeiro que a comensurabilidade e incomensurabilidade com 2π está relacionada com a existência ou não de pontos periódicos.

Lema 5.9. $\rho(f)$ é incomensurável com 2π se, e sómente se, f não tem órbitas periódicas.

Pelo que foi descrito, o número de rotações $\rho(f)$ do homeomorfismo $f : S^1 \rightarrow S^1$ desempenha o mesmo papel que ω nas rotações puras do círculo. Assim, levanta-se o problema de saber de que maneira os homeomorfismos do círculo são topologicamente equivalentes a rotações puras com números de rotação $\rho(f)$.

Seja $f : S^1 \rightarrow S^1$ um homeomorfismo (difeomorfismo) e F uma suspensão. Seja ϕ uma rotação pura de suspensão $R = x + \rho(f)$. Se R e F são topologica-

mente equivalentes tem-se

$$\begin{array}{ccc} & F & \\ \mathbb{R} & \rightarrow & \mathbb{R} \\ h \downarrow & & \downarrow h \\ \mathbb{R} & \rightarrow & \mathbb{R} \\ & R & \end{array}$$

e $h \circ F = R \circ h \Rightarrow h(F(x)) = h(x) + \rho(f)$.

Na teoria de Denjoy a função h é construída analiticamente, pelo facto de $F(x)$ e $R(x)$ terem o mesmo comportamento por iteração:

- a) As iteradas $f^n(x \in S^1)$ e $\phi^n(x \in S^1)$ estão ordenadas da mesma maneira sobre o círculo.
- b) Se $\rho(f)$ é incomensurável com 2π , as órbitas de f e ϕ são densas no círculo.

Lema 5.10. *Seja $f : S^1 \rightarrow S^1$ um homeomorfismo do círculo que preserva orientações e F uma suspensão. Sejam os conjuntos*

$$\begin{aligned} A &= \{R^n(0) + 2\pi m\} = \{n\rho(f) + 2\pi m\} \\ B &= \{F^n(0) + 2\pi m\} \end{aligned} \quad \text{com } n, m \in \mathbb{Z}$$

e a função $h_0 : B \rightarrow A$ definida por

$$h_0(F^n(0) + 2\pi m) = n\rho(f) + 2\pi m.$$

Se, $\rho(f)$ é incomensurável com 2π , então, h_0 é uma bijecção monótona entre A e B .

De facto as órbitas de f e ϕ (rotação) estão ordenadas da mesma maneira sobre o círculo. Para se poder estender a função h_0 a uma equivalência topológica é necessário mostrar que as órbitas de f são densas no círculo. Ora isto nem sempre é verdade para homeomorfismos e é aqui que surge a dificuldade da teoria de Denjoy.

Seja $f : S^1 \rightarrow S^1$. Define-se a variação da função f como

$$\text{Var}(f) = \sup \sum_{k=1}^N |f(x_k)| \quad \left(= \int_0^1 \left| \frac{d}{dx} f(x) \right| dx \right),$$

em que x_1, x_2, \dots, x_N é uma partição do círculo S^1 e o supremo é tomado sobre todas as partições finitas de S^1 .

Teorema 5.11 (Denjoy, [Denjoy, 1932]). *Se $f : S^1 \rightarrow S^1$ é um difeomorfismo com número de rotações incomensurável com 2π e $\log f'$ tem variação limitada, então f e a rotação pura de ângulo $\rho(f)$ são topologicamente equivalentes por h_0 .*

Assim, quando $\rho(f)$ é incomensurável com 2π temos um algoritmo para construir uma equivalência topológica entre f e as rotações do círculo, desde que $\log |f'|$ seja de variação limitada, isto é, a suspensão de f não tem pontos de derivada infinita. Nestas condições, $\rho(f)$ é um invariante topológico.

Exemplo 5.12. A aplicação padrão do círculo (Arnold). Seja o difeomorfismo do círculo (nas coordenadas da carta)

$$\theta_{n+1} = \theta_n + 2\pi\omega + \varepsilon \sin \theta_n \pmod{2\pi}, \quad (5.11)$$

com $0 \leq \varepsilon < 1$. Se $\varepsilon = 1$ a aplicação (5.11) é um homeomorfismo e, para $\varepsilon > 1$, a aplicação (5.11) não é invertível (figura 5.6).

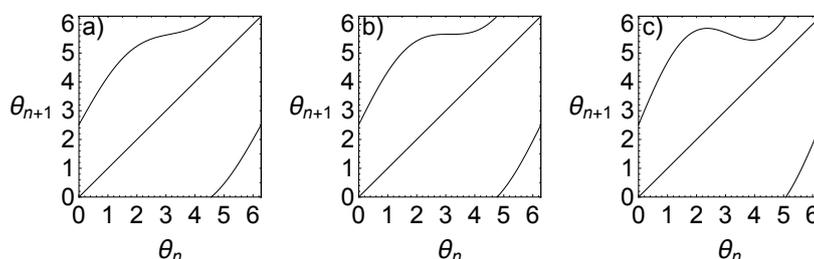


Figura 5.6: Gráfico da aplicação padrão (5.11), para $\omega = 0.4$, a) $\varepsilon = 0.8$, b) $\varepsilon = 1.0$ e c) $\varepsilon = 1.4$.

Na figura 5.7 está representado o número de rotações da aplicação padrão do círculo para vários valores dos parâmetros ε e ω . O número de rotações foi calculado através do valor médio do avanço angular entre cada iteração, de acordo com a proposição 5.7 e a definição 5.8.

O gráfico do número de rotações em função de ε apresenta uma sucessão de patamares separados por saltos. Diz-se que uma função com esta estrutura é uma “escada do diabo” ou uma função com estrutura de conjunto de Cantor. É possível mostrar que a função representada na figura 5.7b) é uma função contínua do parâmetro ω . ■

O teorema de Denjoy é o antecedente geométrico do teorema KAM para sistemas hamiltonianos.

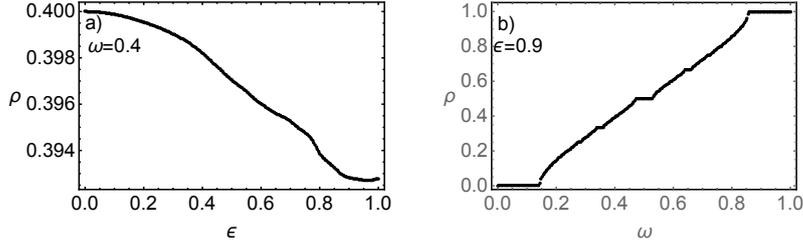


Figura 5.7: Número de rotações da aplicação padrão (5.11) para: a) $\omega = 0.4$ e $\varepsilon \in [0, 1]$; b) $\varepsilon = 0.9$ e $\omega \in [0, 1]$.

5.3 Teorema KAM

O exemplo que se segue é uma introdução intuitiva ao teorema KAM (Kolmogorof, Arnold e Moser).

Exemplo 5.13. A aplicação padrão no cilindro. Ao discretizar a equação diferencial do pêndulo (Exercício 4.1), pode-se optar por duas discretizações possíveis:

$$\begin{cases} \theta_{n+1} - \theta_n = v_n \\ v_{n+1} - v_n = -\omega^2 \sin(\theta_n) \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \theta_{n+1} - \theta_n = v_{n+1} \\ v_{n+1} - v_n = -\omega^2 \sin(\theta_n), \end{cases}$$

em que se fez $\Delta t = 1$. No primeiro caso, a equação às diferenças não é conservativa, enquanto que, no segundo caso, a equação às diferenças é conservativa. Como se verá no capítulo seguinte, a segunda equação às diferenças corresponde a uma discretização implícita. Define-se a aplicação padrão conservativa do cilindro como a transformação

$$\begin{cases} \theta_{n+1} = \theta_n + v_{n+1} \pmod{2\pi} \\ v_{n+1} = v_n - \varepsilon \sin(\theta_n), \end{cases} \quad (5.12)$$

em que se fez $\omega^2 = \varepsilon$. Como θ_n é uma coordenada angular, $\theta_n \in [0, 2\pi]$ e $v_n \in \mathbb{R}$, o espaço de fases da equação às diferenças (5.12) é um cilindro de altura infinita.

Na figura 5.8 estão representadas várias trajectórias de fase do mapa padrão do cilindro (5.12), para vários valores do parâmetro ε . O sistema linear ($\varepsilon = 0$) é constituído por órbitas periódicas caracterizadas por um número de rotações

que neste caso é $\rho_0 = \nu_0 \pmod{2\pi}$. Para $\varepsilon > 0$, algumas órbitas estão deformadas, outras são destruídas, dando origem a órbitas/ilhas periódicas ou a trajetórias irregulares (caóticas).

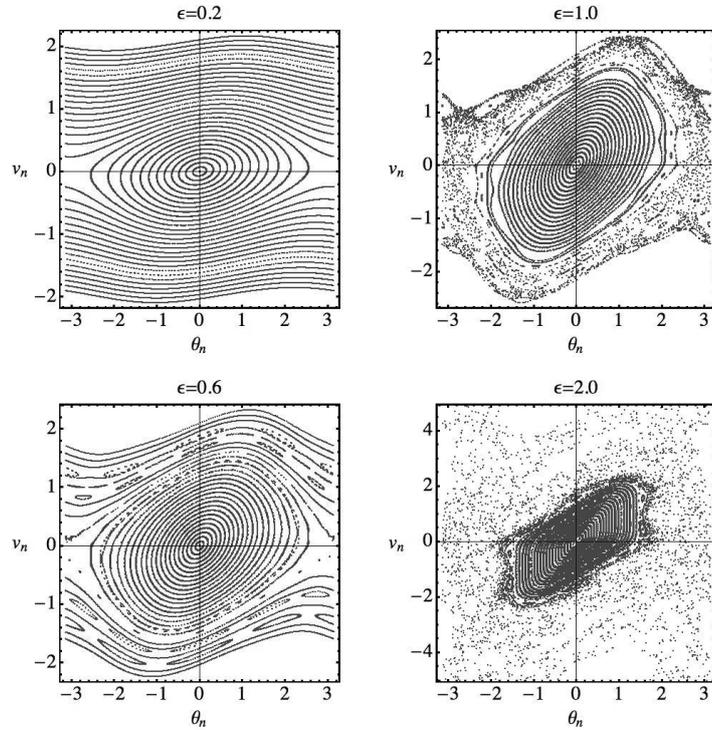


Figura 5.8: Trajectórias de fase do mapa padrão do cilindro (5.12), para vários valores do parâmetro ε .

■

A teoria subjacente para o estudo da persistência das órbitas fechadas das aplicações conservativas do plano designa-se por teoria KAM, de Kolmogorov, Arnold e Moser. Veja-se uma versão simplificada do teorema KAM.

Teorema 5.14 (KAM, [Siegel et al., 1971]). *Seja $x_{n+1} = f(x_n, \varepsilon)$ uma aplicação conservativa de \mathbb{R}^{2n} com um ponto fixo na origem $x = 0$. Suponha-se que para $\varepsilon = 0$ a aplicação é linear e que o espaço de fase é folheado por toros invariantes T^n (para $n = 1$, $T^1 = S^1$). Isto é, as órbitas de fase percorrem densamente o toro que contém as condições iniciais, à excepção de um conjunto*

de medida nula de condições iniciais no toro invariante. Seja $\rho(\varepsilon)$ o vector número de rotações em dimensão n . Então, para ε suficientemente pequeno, alguns dos toros invariantes são destruídos e outros toros invariantes persistem e são deformados. Os toros que são deformados são caracterizados por números de rotação muito irracionais.²

Os resultados numéricos na figura 5.8 para a aplicação do cilindro (5.12) ilustram os resultados do teorema KAM. Para $\varepsilon = 0.2$, muitos círculos invariantes persistem. À medida que se vai variando ε , alguns dos toros invariantes vão sendo destruídos. As regiões na vizinhança de toros invariantes destruídos podem corresponder a órbitas instáveis e muitas vezes não limitadas. É importante salientar que as condições do teorema KAM não são mais explícitas, sendo difícil de identificar os toros que persistem e a abundância dos toros destruídos.

Por exemplo, pensa-se que as lacunas de Kirkwood da cintura principal de asteroides que existe entre Marte e Júpiter pode ser explicada por um mecanismo como o previsto pelo teorema KAM (figura 5.9). Neste caso, quando a razão entre o período de translação dos asteroides e o período de translação de Júpiter se aproxima de um número racional, a abundância destes asteroides é menor.

Na física dos aceleradores de partículas, é possível mostrar que as instabilidades que estão na origem da perda de feixe ocorrem quando a mantissa do número de ondas longitudinal ν_0 das oscilações do feixe de partículas — tune shift — está muito próxima de um número racional. Em particular, $\nu_0 = 1/4$ e $\nu_0 = 1/3$ são valores a evitar [Dilão, 1993b, Dilão *et al.*, 1996]. Na figura 5.10 estão representados as trajectórias de fase de um protão de energia 450 GeV, no acelerador sincrotrão LHC (Large Hadron Collider), na vizinhança da ressonância $\nu_0 = 1/3$. As semelhanças entre a estrutura dos espaços de fases nas figuras 5.8 e 5.10, sugere que o comportamento encontrado na aplicação padrão do cilindro é universal, descrito pelo teorema KAM 5.14. As regiões de estabilidade dos feixes de partículas em aceleradores sincrotrão seguem um padrão muito semelhante ao da figura 5.8.

Exercício 5.1. Mostre que o sistema de equações diferenciais

$$\begin{cases} \dot{x} = \sin(y) \\ \dot{y} = \sin(x) \end{cases}$$

²Um número α é muito irracional, se para todo o racional p/q , existem constantes K e n tais que $|\alpha - p/q| > K/q^n$. No caso do teorema KAM, $n = 2.5$.

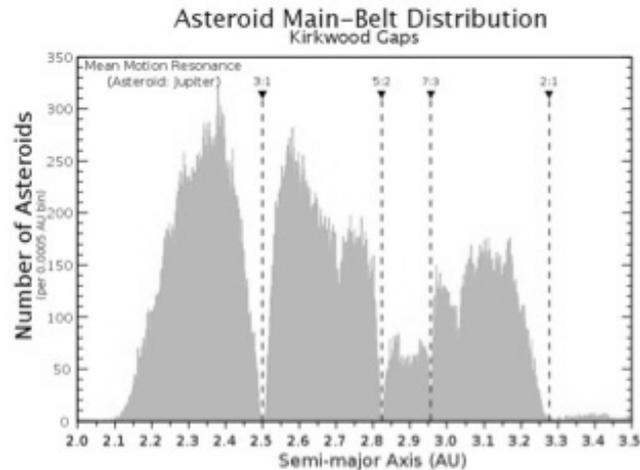


Figura 5.9: Distribuição dos asteroides da cintura principal de asteroides entre Marte e Júpiter, em função do comprimento do semi-eixo maior das trajetórias elípticas, normalizado ao semi-eixo maior de Júpiter. Conjectura-se que as regiões de menor abundância de asteroides correspondem a toros invariantes destruídos (lacunas de Kirkwood) e correspondem a órbitas instáveis, associadas a trajetórias locais não limitadas, eventualmente, do problema de 3-corpos Sol-Júpiter-asteroide.

é hamiltoniano (Exemplo 1.1). Analise a estabilidade dos pontos fixos.

Exercício 5.2. Determine numericamente o homeomorfismo do círculo associados ao ponto fixo $(0,0)$ do sistema hamiltoniano $H = \frac{1}{2}y^2 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{3}x^3$. Calcule numericamente o número de rotações em função da amplitude da condição inicial.

Exercício 5.3. Mostre que $\rho(f^n) = n\rho(f)$ em que $\rho(f)$ é o número de rotações de um homeomorfismo do círculo.

Exercício 5.4. Estude numericamente o espaço de fases da aplicação padrão do círculo, para $\varepsilon < 1$ e $\varepsilon > 1$. Imagine a seguinte experiência numérica: Para cada valor do parâmetro ε e para uma condição inicial, calcule as primeiras duzentas iteradas. Continue a iterar e represente graficamente todos os valores das iteradas 201 até, por exemplo, 400. Note que neste gráfico a abcissa é ε e na ordenada estão representados todos os valores das iteradas 201-400. Do gráfico assim construído tire conclusões sobre a dinâmica.

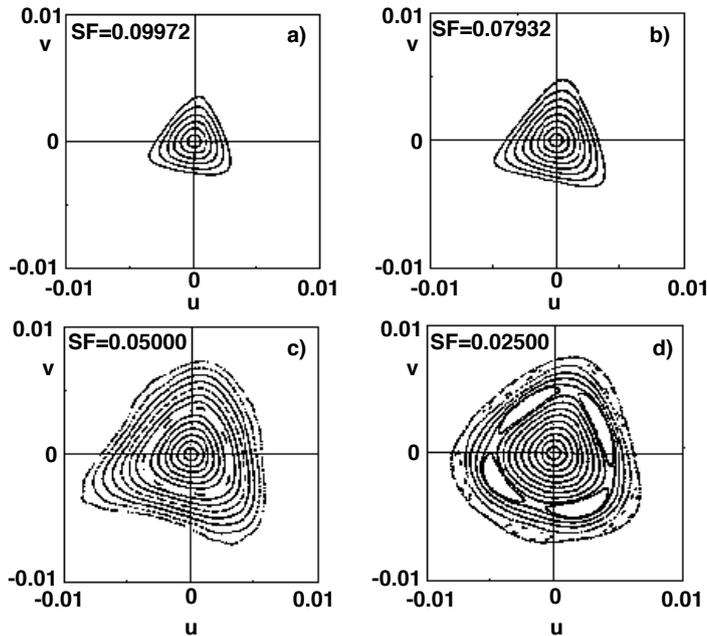


Figura 5.10: Espaço de fases de um próton de energia 450 GeV, no acelerador síncrotrão LHC (Large Hadron Collider), na vizinhança da ressonância $\nu_0 = 1/3$. O parâmetro de controlo SF está associado a uma força sextupolar de focagem que permite controlar a proximidade da ressonância $\nu_0 = 1/3$ ([Dilão, 1993b, Dilão *et al.*, 1996]).

Exercício 5.5. Mostre que a aplicação de Hénon

$$\begin{cases} x_{n+1} = \cos(2\pi\alpha)x_n + \sin(2\pi\alpha)y_n + \sin(2\pi\alpha)x_n^2 \\ y_{n+1} = -\sin(2\pi\alpha)x_n + \cos(2\pi\alpha)y_n + \cos(2\pi\alpha)x_n^2 \end{cases}$$

é uma aplicação conservativa do plano, em que $\alpha \in [0, 1/2]$. Determine os pontos fixos de período 1 e estude a sua estabilidade. Faça um estudo numérico das órbitas de fase para vários valores do parâmetro α .

Exercício 5.6. Seja o sistema de equações diferenciais

$$\begin{cases} \dot{x} = ax + by \\ \dot{y} = cx + dy \end{cases}$$

em que a, b, c e d são parâmetros reais. Sejam as transformações de variáveis $T = \{t \rightarrow -t\}$ e $P = \{x \rightarrow y, y \rightarrow x\}$. Se o sistema de equações diferenciais é invariante depois de se efectuarem as transformações T e P , diz-se que o sistema de equações tem uma simetria TP .

- a) Encontre condições nos parâmetros para que o sistema de equações tenha uma simetria TP .
- b) Mostre que o sistema de equações com simetria TP é Hamiltoniano.
- c) Faça os gráficos das curvas de nível da função de Hamilton, para $a > b$ e $a < b$. Infira sobre a topologia das soluções do sistema simétrico.

Capítulo 6

Métodos numéricos

Em geral, não é possível determinar explicitamente as soluções de sistemas de equações diferenciais não-lineares, sendo necessário recorrer a métodos de análise numérica. O teorema de existência e unicidade dá-nos desde logo um algoritmo para a construção aproximada de soluções de equações diferenciais, sugerindo que as derivadas podem ser substituídas por aproximações às diferenças finitas. Assim, a técnica mais simples para construir algoritmos numéricos para a integração de equações diferenciais é através da substituição das derivadas por aproximações com diferenças finitas.

Para a integração da equação

$$\dot{x} = f(x), \quad \text{com } x \in \mathbb{R}, \quad (6.1)$$

a equação às diferenças finitas mais simples é

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t f(x_n), \quad (6.2)$$

em que $x_n = x(n\Delta t)$. Assim, conhecendo x_0 é sempre possível determinar por recorrência os valores de x_1, x_2, \dots . O problema que se põe é o de saber se as soluções obtidas através (6.2) coincidem com as soluções de (6.1).

A melhor maneira de analisar esta questão é através da integração das equações (6.1) e de (6.2) e depois comparar as soluções (benchmarking). Por exemplo, suponha-se que $f(x) = ax$, em que a é uma constante. Então, por integração directa, as soluções de (6.1) e (6.2) são, respectivamente,

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 e^{at} \\ x_n &= x_0 (1 + \Delta t a)^n \Rightarrow \bar{x}(t) = x_0 (1 + \Delta t a)^{(t/\Delta t)}, \end{aligned} \quad (6.3)$$

em que $n = t/\Delta t$ e $\bar{x}(t)$ é a solução que aproxima $x(t)$. Na figura 6.1, estão representados os gráficos das soluções (6.3) em função do tempo, para vários valores de a . No limite $t \rightarrow \infty$, quando a e Δt são ambos positivos, as soluções divergem. Para a negativo e $0 < \Delta t < 1/|a|$, as soluções mantêm-se próximas. Faça-se então o estudo da convergência das soluções (6.3).

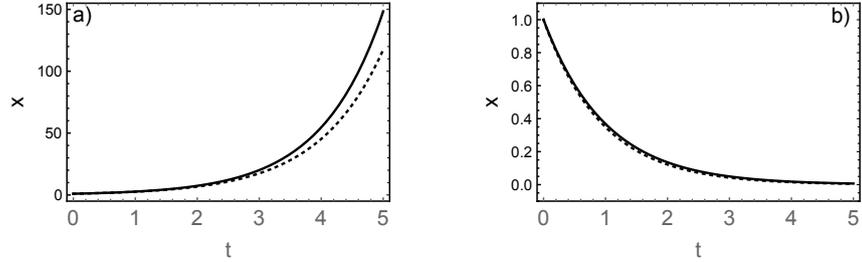


Figura 6.1: Comparação entre as soluções numéricas (a ponteados) e exactas (a cheio) da equação diferencial linear $\dot{x} = ax$. a) $a = 1, \Delta t = 0.1$. b) $a = -1, \Delta t = 0.1$.

Sejam $x(t)$ e $\bar{x}(t)$ as soluções exacta e aproximada de (6.1) com $f(x) = ax$. Para t fixo, o *erro global* entre as duas soluções é

$$e_n := e(t; \Delta t = \frac{t}{n}) = |\bar{x}(t; \Delta t) - x(t; \Delta t)| \quad (6.4)$$

em que \bar{x} é a solução da equação às diferenças (6.2), ou a solução aproximada de (6.1). Para calcular o erro global (6.4), comece-se por desenvolver a solução de (6.1) em série de Taylor

$$\begin{aligned} x(t + \Delta t; \Delta t) &= x(t; \Delta t) + \Delta t f(x(t; \Delta t)) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &\leq x(t; \Delta t) + \Delta t f(x(t; \Delta t)) + B\Delta t^2, \end{aligned} \quad (6.5)$$

em que B é uma constante. Então, por (6.4) e (6.5),

$$e_{n+1} = |\bar{x}(t + \Delta t; \Delta t) - x(t + \Delta t; \Delta t)| \leq e_n + \Delta t |f(\bar{x}(t; \Delta t)) - f(x(t; \Delta t))| + |B|\Delta t^2.$$

Com $f(x) = ax$, tem-se que

$$e_{n+1} \leq e_n |1 + a\Delta t| + |B|\Delta t^2.$$

Então, por recorrência, vem que

$$\begin{aligned} e_n &\leq (1 + a\Delta t)^n e_0 + |B|\Delta t^2 (1 + (1 + a\Delta t) + \dots + (1 + a\Delta t)^{n-1}) \\ &\leq (1 + a\Delta t)^n e_0 + \frac{|B|}{a} \Delta t |(1 + a\Delta t)^n - 1|. \end{aligned}$$

Mas como $(1+x) \leq e^x$, a desigualdade anterior escreve-se na forma

$$e_n \leq e_0 e^{an\Delta t} + \frac{|B|}{a} \Delta t |e^{at} - 1|.$$

Como no instante inicial $t = 0$, $e_0 = 0$, vem então que

$$e_n \leq \frac{B}{a} \Delta t |e^{at} - 1|,$$

em que fizemos $t = n\Delta t$. Seja T um valor fixo de t . Seja a constante, $\gamma = B|e^{aT} - 1|/a > 0$. Então, $e_n \leq \gamma\Delta t$. Para $t = T$ fixo, é possível encontrar Δt tal que o erro global é majorado pela constante $\Delta t\gamma$ e, quando $\Delta t \rightarrow 0$, o erro global converge para zero.

Concluimos assim que as soluções obtidas pelo método numérico (6.2) estão próximas das soluções de (6.1), no intervalo fechado $[0, T]$, desde que Δt seja suficientemente pequeno. Claro está que Δt depende de T .

Esta análise sugere a definição:

Definição 6.1. Um método numérico para a integração de uma equação diferencial ordinária, com $t \in [0, T]$, é *convergente*, se o erro global entre as soluções das equações contínua e discreta convergem para zero quando $\Delta t \rightarrow 0$,

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} e(t; \Delta t) = 0.$$

Esta condição é apenas válida quando as condições iniciais do método numérico e da equação diferencial são as mesmas.

Em geral, equações às diferenças que conduzam a erros globais da forma $e_n \leq \gamma|\Delta t|^p$, em que γ é uma constante, são designadas por *métodos de ordem p*. O método de Euler (6.2) é pois um método de ordem 1.

Um método simples de gerar métodos numéricos de ordem $p > 1$ é através da série de Taylor — método de Lax-Wendorff. Seja a equação diferencial não-autónoma

$$\dot{x} = f(x, t), \quad \text{com } x \in \mathbb{R}^n. \quad (6.6)$$

Para construir um método numérico para a integração da equação diferencial (6.6), começa-se por desenvolver a sua solução em série de Taylor

$$\begin{aligned} \phi(t + \Delta t) &= \phi(t) + \Delta t \phi'(t) + \Delta t^2 \phi''(t)/2! + \dots \\ &= \phi(t) + \Delta t f(x, t) + \Delta t^2 (f_t + f_x f)/2! + \dots \end{aligned} \quad (6.7)$$

Com $t_n = n\Delta t$, $x_n = x(n\Delta t) = \phi(n\Delta t)$, de (6.7), vem que

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t f(x_n, t_n) + \Delta t^2 (f_t(x_n, t_n) + f_x(x_n, t_n) f(x_n, t_n)) / 2!.$$

No entanto, esta técnica introduz cálculos adicionais, tornando-se pouco eficiente para métodos de ordem $p > 2$. Contudo, para o caso da equação diferencial linear $\dot{x} = ax$, de (6.7), obtém-se uma equação discreta que coincide com a solução analítica da equação contínua, para $t = n\Delta t$. Ora, veja-se. Como $\phi(t) = x_0 e^{at}$, $\phi^{(n)}(t) = a^n x = a^n \phi(t)$ e portanto

$$\phi(t + \Delta t) = x + \Delta t a x + \Delta t^2 a^2 x / 2! + \dots = x(1 + \Delta t a + \Delta t^2 a^2 / 2! + \dots).$$

Então

$$x_{n+1} = x_n e^{a\Delta t}.$$

Neste caso linear, o erro global é nulo e o método numérico é exacto. Contudo, na maioria dos casos não é possível somar a série associada ao método de Lax-Wendorff.

Veja-se outra técnica que envolve apenas as componentes do campo de vectores. Por exemplo, suponha-se que a aproximação a (6.6) se escreve na forma

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t a_1 f(x_n, t_n) + \Delta t a_2 f(x_n + p_2 \Delta t f(x_n, t_n), t_n + p_1 \Delta t), \quad (6.8)$$

em que a_1, a_2, p_1 e p_2 são constantes a determinar. Desenvolvendo o segundo membro de (6.8) em série de Taylor, obtém-se

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t (a_1 + a_2) f(x_n, t_n) + \Delta t^2 a_2 p_1 f_t(x_n, t_n) + \Delta t^2 a_2 p_2 f_x(x_n, t_n) f(x_n, t_n). \quad (6.9)$$

Comparando (6.9) com (6.7), obtêm-se as equações,

$$a_1 + a_2 = 1; \quad a_2 p_1 = \frac{1}{2}; \quad a_2 p_2 = \frac{1}{2}.$$

Escolhendo $a_2 = 1/2$, obtém-se o método de Heun ou Runge-Kutta de segunda ordem:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{\Delta t}{2} (f(x_n, t_n) + f(x_n + \Delta t f(x_n, t_n), t_n + \Delta t)). \quad (6.10)$$

Com $a_2 = 1$, obtém-se o método de Collatz ou método de Euler modificado:

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t f(x_n + \frac{\Delta t}{2} f(x_n, t_n), t_n + \frac{\Delta t}{2}). \quad (6.11)$$

Ambos os métodos (6.10) e (6.11) são de segunda ordem.

Por um método análogo, pode-se deduzir o método de Runge-Kutta de quarta ordem:

$$\begin{cases} x_{n+1} &= x_n + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 &= f(x_n, t_n) \\ k_2 &= f(x_n + \frac{\Delta t}{2}k_1, t_n + \frac{\Delta t}{2}) \\ k_3 &= f(x_n + \frac{\Delta t}{2}k_2, t_n + \frac{\Delta t}{2}) \\ k_4 &= f(x_n + \Delta t k_3, t_n + \Delta t). \end{cases} \quad (6.12)$$

O método numérico mais utilizado para a resolução de equações diferenciais é o método de Runge-Kutta de quarta ordem (6.12). Este método numérico conduz a resultados com um erro muito pequeno, desde que as órbitas de fase sejam limitadas. Para sistemas conservativos com um potencial central, este método conduz a resultados que conservam a energia e o momento angular, [Hairer *et al.*, 2002], pelo que é um método que origina resultados bastante fiáveis. No entanto, para sistemas cujo campo de vectores têm componentes de variação muito rápida (sistemas stiff), o método de Runge-Kutta tem uma aplicação limitada. Como as propriedades de stiffness podem ser detectadas através da análise qualitativa do fluxo de fase, a decisão sobre a utilização de um método numérico para integração de uma equação diferencial só pode ser feita depois desta análise.

As técnicas de construção de métodos numéricos para a integração de equações diferenciais que acabámos de analisar sugerem-nos a definição de *consistência* de um método numérico.

Definição 6.2. Um método numérico para a integração da equação diferencial (6.6) da forma

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t F(x_n, t_n; \Delta t)$$

é *consistente*, se

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} F(x_n, t_n; \Delta t) = f(x_n, t_n).$$

A aproximação ao campo de vectores utilizada em (6.8)-(6.9) é consistente, desde que $a_1 + a_2 = 1$.

Para as equações diferenciais lineares é sempre possível encontrar um método exacto de integração numérica. Seja então a equação linear $\dot{x} = Ax$ em

que A é uma matriz. Como se sabe, se $\det A \neq 0$, existe uma transformação de variáveis $x = Cz$ tal que a equação $\dot{x} = Ax$ se transforma no sistema $\dot{z} = Dz$, em que $D = C^{-1}AC$ é uma matriz diagonal, eventualmente complexa (Apêndice B). Se os valores próprios de D são todos diferentes, então a solução geral de $\dot{z} = Dz$ é

$$z(t) = e^{tD}z_0.$$

Fazendo $t = \Delta t$, obtém-se $z_{n+1} = z_n e^{\Delta t D}$. Invertendo a transformação de variáveis anteriores, chega-se a

$$x_{n+1} = C e^{\Delta t D} C^{-1} x_n.$$

Assim, demonstrou-se:

Teorema 6.3. *Seja o sistema de equações lineares $\dot{x} = Ax$ em que A é uma matriz não singular ($\det A \neq 0$). Suponha-se que os valores próprios da matriz A são todos diferentes. Seja o sistema linear associado $\dot{z} = Dz$, em que D é uma matriz diagonal, eventualmente complexa. Então as soluções da equação às diferenças*

$$x_{n+1} = C e^{\Delta t D} C^{-1} x_n$$

coincidem com as soluções da equação diferencial linear $\dot{x} = Ax$, para $t = n\Delta t$, independentemente do valor de Δt .

Aplicando o resultado anterior à equação do oscilador harmónico (5.3), obtém-se o método numérico exacto

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ y_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\Delta t \omega) & \sin(\Delta t \omega)/\omega \\ -\omega \sin(\Delta t \omega) & \cos(\Delta t \omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix} := B \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix}, \quad (6.13)$$

em que $\det B = 1$. Assim, o método numérico (6.13) preserva o volume de fases, sendo um método numérico exacto para a integração da equação do oscilador harmónico. No entanto para sistemas não lineares esta técnica é de difícil utilização.

No caso dos sistemas Hamiltonianos, o método de Störmer-Verlet de ordem 2 é um exemplo de um sistema de integração numérica que preserva o volume de fase. Seja então o sistema hamiltoniano separado $H(q, p) = p^2/(2m) + V(q)$, em que $p, q \in \mathbb{R}^n$. O método de Störmer-Verlet de ordem

2 é definido por

$$\begin{cases} p_{n+1/2} = p_n - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q}(q_n) \\ q_{n+1} = q_n + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p}(p_{n+1/2}) \\ p_{n+1} = p_{n+1/2} - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q}(q_{n+1}), \end{cases} \quad (6.14)$$

em que Δt é o passo de integração, $p_n = p(n\Delta t)$, $q_n = q(n\Delta t)$ e $p_{n+1/2}$ é um valor intermédio do momento. Veja-se então que o método de integração numérica de Störmer-Verlet é conservativo.

Sem perda de generalidade, considere-se o caso em que $p, q \in \mathbb{R}$. O sistema é conservativo se o Jacobiano da transformação (6.14) tem determinante 1. Ora,

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} &= 1 - \frac{\Delta t^2}{m} V_{qq}(q_n), & \frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} &= \frac{\Delta t}{m}, \\ \frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} &= -\frac{\Delta t^3}{m} V_{qq}^2(q_n), & \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} &= 1 + \frac{\Delta t^2}{m} V_{qq}(q_n). \end{aligned} \quad (6.15)$$

Por um cálculo simples, o determinante da matriz Jacobiana construída a partir de (6.15) tem o valor 1.

Outra classe de métodos numéricos com propriedades de convergência são os métodos numéricos implícitos. Considere-se a equação diferencial geral (6.6) e construa-se o método de Euler implícito

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t f(t_{n+1}, x_{n+1}). \quad (6.16)$$

A equação (6.16) define um método numérico consistente.

Se f não é uma função linear, para resolver a equação às diferenças implícita (6.16) tem que se recorrer a técnicas numéricas de resolução de equações algébricas, das quais uma das mais robustas é o método de Newton-Raphson. Em geral, as técnicas implícitas tem propriedades fortes de convergência e, na vizinhança de pontos fixos assintoticamente estáveis, fornecem soluções numéricas muito próximas das soluções exactas. No entanto, estes métodos podem tornar-se computacionalmente pesados.

Para equações em que a variação do campo de vectores no espaço de fases é muito rápida (equações stiff), os métodos implícitos são os mais apropriados

para a sua integração numérica. Por exemplo, considere-se a equação diferencial linear

$$\begin{cases} \dot{x} &= -501x + 499y \\ \dot{y} &= 499x - 501y, \end{cases} \quad (6.17)$$

que tem a solução geral

$$\begin{cases} x(t) &= c_{11}e^{-1000t} + c_{12}e^{-2t} \\ y(t) &= c_{21}e^{-1000t} - c_{22}e^{-2t}, \end{cases} \quad (6.18)$$

em que os c_{ij} são constantes a determinar através das condições iniciais. Por aplicação do método de Euler explícito a (6.17), obtém-se a solução

$$\begin{cases} x_n &= c_1(1 - 1000\Delta t)^n + c_2(1 - 2\Delta t)^n \\ y_n &= c_1(1 - 1000\Delta t)^n - c_2(1 - 2\Delta t)^n. \end{cases} \quad (6.19)$$

Por análise de (6.18), decorre que, quando $t \rightarrow \infty$, as soluções convergem para o ponto $(0,0)$ do espaço de fases. Mas, por (6.19), para que as soluções do método discreto apresentem o mesmo comportamento assintótico, tem que se ter a condição, $|1 - 1000\Delta t| < 1$, ou seja, o passo de integração Δt tem que estar no interior do intervalo $[0, 2/1000 = 0.002]$. Ora, a componente e^{-1000t} de (6.18) é muito pequena e não vai influenciar o comportamento quantitativo da solução de (6.17), no entanto, a contribuição deste termo vai ser determinante para a convergência do método numérico, obrigando a um passo de integração muito pequeno. Esta é uma das características dos sistemas stiff.

Exemplo 6.4. Seja a equação diferencial $\dot{x} = 100x(1 - x)$. Aplicando o método de Euler implícito (6.16), obtém-se

$$x_{n+1} = x_n + 100\Delta t x_{n+1}(1 - x_{n+1}). \quad (6.20)$$

Suponha-se que no instante $t = 0$, a condição inicial é x_0 . Para calcular x_1 procede-se da seguinte maneira: Comece-se por impor uma estimativa para x_1 , por exemplo $x_1 = x_0$ e escreve-se a equação às diferenças implícita (6.20) na forma $f(x_n, x_{n+1}) = 0$. Então, define-se uma nova iteração (método de Newton-Raphson) através de

$$x_{n+1}^{(p+1)} = x_{n+1}^{(p)} - \frac{f(x_n, x_{n+1}^{(p)})}{\frac{\partial f}{\partial x_{n+1}}(x_n, x_{n+1}^{(p)})}, \quad (6.21)$$

com $p = 0, 1, \dots$. Fazendo $x_1^{(0)} = x_0$, no limite quando $p \rightarrow \infty$, a equação às diferenças (6.21) converge para x_1 . Neste caso particular, (6.21) tem a forma

$$x_{n+1}^{(p+1)} = x_{n+1}^{(p)} - \frac{x_{n+1}^{(p)} - x_n - 100\Delta t x_{n+1}^{(p)}(1 - x_{n+1}^{(p)})}{1 - 100\Delta t + 200\Delta t x_{n+1}^{(p)}}.$$

Em termos práticos, a convergência de (6.21) em p é muito rápida, sendo um dos métodos mais eficientes para a determinação de raízes de equações. ■

Para o caso de sistemas Hamiltonianos não separados, isto é, quando a energia cinética depende das variáveis q e dos momentos conjugados p , a energia é conservada com o método implícito de Störmer-Verlet de ordem 2. Seja então o sistema hamiltoniano não separado $H(q, p)$, em que $p, q \in \mathbb{R}^n$. O método implícito de Störmer-Verlet de ordem 2 é definido por

$$\begin{cases} p_{n+1/2} &= p_n - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial H}{\partial q}(p_{n+1/2}, q_n) \\ q_{n+1} &= q_n + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial H}{\partial p}(p_{n+1/2}, q_n) + \frac{\partial H}{\partial p}(p_{n+1/2}, q_{n+1}) \right) \\ p_{n+1} &= p_{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial H}{\partial q}(p_{n+1/2}, q_{n+1}), \end{cases}$$

em que Δt é o passo de integração, $p_n = p(n\Delta t)$, $q_n = q(n\Delta t)$ e $p_{n+1/2}$ é um valor intermédio do momento.

Do ponto de vista da utilização de métodos numéricos para a integração de equações diferenciais ou de equações às derivadas parciais, há que ter atenção à fiabilidade das aproximações, assim como ao domínio de validade das aproximações. De facto, quando se está a trabalhar com sistemas não-lineares é importante comparar previsões com vários métodos numéricos diferentes e testar o modo como se dá a convergência para uma solução hipotética, quando se variam os parâmetros de discretização. Por isto, na linguagem dos métodos numéricos aparece muitas vezes os conceitos de benchmarking, validação e calibração.

Designa-se por benchmarking a comparação entre soluções numéricas e analíticas. Em muitos sistemas, isto pode ser feito através da comparação entre as soluções numéricas e soluções particulares integráveis. Por exemplo, no caso da figura 6.1 foi feito o benchmarking do método numérico analisado.

A calibração é a manipulação de variáveis e parâmetros de modo que exista concordância entre as variáveis simuladas e observadas.

A validação de um método numérico é a comparação entre os resultados numéricos com o comportamento no mundo real. O processo de validação é feito no contexto do modelo e não reflecte a fiabilidade com que o modelo representa o mundo real.

Os resultados numéricos para prever e inferir propriedades e comportamentos de sistemas só fazem sentidos quando é efectuado o benchmarking e os resultados são calibrados e validados. Por outro lado, muitos métodos numéricos para equações diferenciais não têm as mesmas propriedades estruturais que as equações que pretendem descrever. Assim, é importante que as propriedades estruturais do método numérico e das equações diferenciais sejam as mesmas, [Hairer *et al.*, 2002]. Em particular, o método (5.12) para a integração numérica da equação do pêndulo apresenta soluções que não existem na equação contínua (Exercício 6.2). Neste caso, o método (5.12) é consistente e estável.

Exercício 6.1. Escreva explicitamente a equação às diferenças associada ao método de Störmer-Verlet para a integração da equação diferencial do oscilador harmónico de hamiltoniano $H = y^2/2 + \omega^2 x^2/2$. Em seguida relacione a equação às diferenças assim obtida com a equação às diferenças do método numérico (6.13).

Exercício 6.2. Escreva explicitamente a equação às diferenças associada ao método de Störmer-Verlet para a integração da equação diferencial do pêndulo

$$\ddot{x} + \omega^2 \sin x = 0,$$

em que ω é uma constante. Determine a estabilidade dos pontos fixos de período 1 da equação às diferenças. Faça algumas simulações numéricas e compare com os resultados da figura 5.8.

Exercício 6.3. Estude a estabilidade da origem $(0, 0)$ da equação às diferenças obtida pelo método de Euler implícito para a integração da equação diferencial linear

$$\begin{cases} \dot{x} &= -501x + 499y \\ \dot{y} &= 499x - 501y. \end{cases}$$