

**Introdução à Física Computacional - 7600017 - 1S/2019**  
**Projeto 4 — Força central**

**Descrição:**

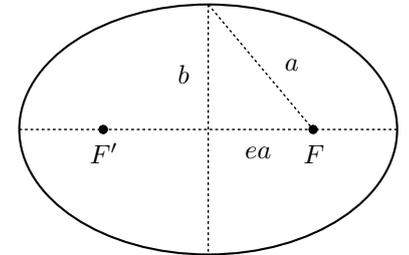
Discutiremos nesse projeto o movimento de “partículas” que interagem por uma força central  $\mathbf{F}_{i,j} = F(\mathbf{r}_{i,j}) \hat{\mathbf{r}}_{i,j}$ , onde  $\mathbf{r}_{i,j} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  e  $\mathbf{r}_\alpha$  é a posição da  $\alpha$ -ésima partícula. Em particular, estaremos interessados na lei de Gravitação de Newton que é um caso específico desse tipo de força:

$$\mathbf{F}_{1,2} = -\frac{Gm_1m_2}{|\mathbf{r}_{1,2}|^3} \mathbf{r}_{1,2}, \quad (1)$$

onde  $m_{1(2)}$  é a massa do planeta 1(2),  $G$  é a constante gravitacional e  $r = |\mathbf{r}|$  é o módulo do vetor  $\mathbf{r}$ . Nesse caso, consideraremos os planetas se movendo em um plano, o que é uma excelente aproximação para o sistema solar, e, portanto, uma simulação bidimensional será suficiente. Como a órbita dos planetas é periódica, não podemos utilizar o método de Euler, uma vez que ele não conserva energia e leva a órbitas instáveis. Por isso, utilizaremos o método de Euler-Cromer. Além disso, utilizaremos um método importante de integração numérica conhecido por método de Runge-Kutta.

**1. O problema de dois corpos: órbitas limitadas**

Desde os trabalhos pioneiros de Kepler, sabemos que os planetas se movem em órbitas elípticas com o Sol em um dos focos. Na figura ao lado, mostramos uma elipse com seus focos  $F$  e  $F'$ , semieixos maior  $a$  e menor  $b$  bem como excentricidade  $e = \sqrt{1 - (b/a)^2}$ . No limite em que  $e = 0$ , tem-se uma órbita circular. Sabemos que esse resultado segue triunfalmente da lei da gravitação de Newton na Eq. (1) e queremos aqui reimplementar essa solução de modo numérico. Antes de discutirmos o método numérico, contudo, vamos estabelecer as unidades mais convenientes para estudarmos o problema. Por se tratar de um problema astronômico, utilizaremos, não muito surpreendentemente, a chamada Unidade Astronômica (UA) para medirmos comprimento.



Uma unidade astronômica de comprimento, ou simplesmente 1 UA, é definida como a distância média Terra-Sol ( $\approx 1.5 \times 10^{11}$  m). O tempo é convenientemente medido em anos ( $1 \text{ ano} \approx 3.2 \times 10^7$  s), o que corresponde, naturalmente, ao período de rotação da Terra ao redor do Sol. Desejamos reescrever a lei de Newton nessas unidades. Definindo

$$\boldsymbol{\rho} = \frac{1}{\text{UA}} \mathbf{r} \text{ e } \tau = \frac{2\pi}{\text{ano}} t, \quad (2)$$

então

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\frac{GM_\odot m}{r^3} \mathbf{r}, \Rightarrow \frac{d^2 \boldsymbol{\rho}}{d\tau^2} = \ddot{\boldsymbol{\rho}} = -\frac{GM_\odot \text{ano}^2}{(2\pi)^2 \text{UA}^3} \frac{\boldsymbol{\rho}}{\rho^3} = -\frac{\boldsymbol{\rho}}{\rho^3}, \quad (3)$$

onde, na última igualdade, usamos que  $GM_\odot = 4\pi^2 \text{UA}^3 \text{ano}^{-2}$ . Este resultado é obtido da seguinte maneira. Aproximando-se a órbita da Terra como circular

$$\frac{M_\oplus v^2}{r} = \frac{GM_\oplus M_\odot}{r^2}, \quad (4)$$

donde vem que

$$GM_\odot = v^2 r = \left( \frac{2\pi r}{\text{ano}} \right)^2 r = 4\pi^2 \frac{(\text{UA})^3}{\text{ano}^2}. \quad (5)$$

ou seja,  $GM_\odot = (2\pi)^2$  em unidades astronômicas.

Vamos considerar inicialmente o problema de dois corpos, planeta + Sol. Pelo fato de a massa do Sol ser muito

maior que a massa dos planetas, vamos tomar o Sol parado na origem:  $v_S = 0$  e  $(x_S, y_S) = (0, 0)$ . As equações de movimento para as coordenadas  $(x, y)$  de um dado planeta são

$$\frac{d^2 \rho_x}{d\tau^2} = \ddot{\rho}_x = -\frac{\rho_x}{\rho^3} \text{ e } \frac{d^2 \rho_y}{d\tau^2} = \ddot{\rho}_y = -\frac{\rho_y}{\rho^3}, \quad (6)$$

onde

$$\rho = \sqrt{\rho_x^2 + \rho_y^2}, \quad (7)$$

é a distância instantânea do planeta com relação ao Sol em unidades astronômicas. Seguindo o mantra usual, reescrevemos as duas equações diferenciais de segunda ordem como quatro equações diferenciais de primeira ordem, ou seja,

$$\dot{\rho}_x = v_x \text{ e } \dot{v}_x = -\frac{\rho_x}{\rho^3}, \quad (8)$$

$$\dot{\rho}_y = v_y \text{ e } \dot{v}_y = -\frac{\rho_y}{\rho^3}, \quad (9)$$

onde  $v_x$  e  $v_y$  são, respectivamente, as velocidades ao longo das direções  $x$  e  $y$ . Dentro do método de Euler-Cromer (EC), as quatro diferenciais em (8) e (9) são aproximadas por

$$v_{x,i+1} = v_{x,i} - \frac{\rho_{x,i}}{\rho_i^3} \Delta\tau, \quad (10)$$

$$\rho_{x,i+1} = \rho_{x,i} + v_{x,i+1} \Delta\tau, \quad (11)$$

$$v_{y,i+1} = v_{y,i} - \frac{\rho_{y,i}}{\rho_i^3} \Delta\tau, \quad (12)$$

$$\rho_{y,i+1} = \rho_{y,i} + v_{y,i+1} \Delta\tau, \quad (13)$$

onde  $\Delta\tau$  é o passo temporal (em unidades de  $\frac{\text{ano}}{2\pi}$ ).

Um outro importante método de integração numérica é o de Runge-Kutta. Para o caso em questão, o método em quarta ordem de aproximação em  $\Delta\tau$  diz que deve-se iterar as seguintes equações:

$$\rho_{x,i+1} = \rho_{x,i} + \frac{\Delta\tau}{6} \left( F_{1,i}^{(1)} + 2F_{1,i}^{(2)} + 2F_{1,i}^{(3)} + F_{1,i}^{(4)} \right), \quad (14)$$

$$\rho_{y,i+1} = \rho_{y,i} + \frac{\Delta\tau}{6} \left( F_{2,i}^{(1)} + 2F_{2,i}^{(2)} + 2F_{2,i}^{(3)} + F_{2,i}^{(4)} \right), \quad (15)$$

$$v_{x,i+1} = v_{x,i} + \frac{\Delta\tau}{6} \left( F_{3,i}^{(1)} + 2F_{3,i}^{(2)} + 2F_{3,i}^{(3)} + F_{3,i}^{(4)} \right), \quad (16)$$

$$v_{y,i+1} = v_{y,i} + \frac{\Delta\tau}{6} \left( F_{4,i}^{(1)} + 2F_{4,i}^{(2)} + 2F_{4,i}^{(3)} + F_{4,i}^{(4)} \right), \quad (17)$$

onde

$$F_{1,i}^{(j)} = v_{x,i}^{(j)}, \quad F_{2,i}^{(j)} = v_{y,i}^{(j)}, \quad F_{3,i}^{(j)} = -\frac{\rho_{x,i}^{(j)}}{\rho_i^{(j)3}} \text{ e } F_{4,i}^{(j)} = -\frac{\rho_{y,i}^{(j)}}{\rho_i^{(j)3}},$$

com

$$\rho_{x,i}^{(j)} = \rho_{x,i} + C^{(j)} \Delta t F_{1,i}^{(j-1)}, \quad \rho_{y,i}^{(j)} = \rho_{y,i} + C^{(j)} \Delta t F_{2,i}^{(j-1)},$$

$$v_{x,i}^{(j)} = v_{x,i} + C^{(j)} \Delta t F_{3,i}^{(j-1)}, \quad \text{e } v_{y,i}^{(j)} = v_{y,i} + C^{(j)} \Delta t F_{4,i}^{(j-1)},$$

e  $\rho_i^{(j)} = \sqrt{\rho_{x,i}^{(j)2} + \rho_{y,i}^{(j)2}}$ , com  $C^{(1)} = 0$ ,  $C^{(2)} = C^{(3)} = \frac{1}{2}$ , e  $C^{(4)} = 1$ . (Para  $j = 1$ , não se preocupe com  $F^{(j-1)}$  porque  $C^{(1)} = 0$ .)

- (a) Escreva um programa FORTRAN que calcula a posição  $\boldsymbol{\rho}(\tau)$  e velocidade  $\boldsymbol{v}(\tau)$  de um planeta como função do tempo implementando o método de EC por meio das Eqs. (10)-(13).

Planeta	massa ( $M_{\oplus}$ )	semieixo maior (UA)	excentricidade ( $e$ )
Mercúrio	0.055	0.39	0.206
Vênus	0.815	0.72	0.007
Terra	1	1.00	0.017
Marte	0.107	1.52	0.093
Júpiter	318	5.20	0.049
Saturno	95.2	9.58	0.057
Urano	14.5	19.2	0.046
Netuno	17.1	30.1	0.009

Tabela I: Dados planetários úteis. A massa do Sol é  $M_{\odot} = 3.33 \times 10^5 M_{\oplus} = 1.99 \times 10^{30}$  Kg e a massa da Terra é  $M_{\oplus} = 5.97 \times 10^{24}$  Kg.

- (b) Considere a tabela I. Determine a velocidade que cada planeta deveria ter para que sua órbita fosse circular com o raio dado pelo semieixo maior  $a$  da elipse. Você deve se certificar que a órbita permanece circular após muitas revoluções. Para tal, uma escolha cuidadosa de  $\Delta\tau$  é necessária. Determine  $\delta = \rho_{\max}/\rho_{\min} - 1$ , onde  $\rho_{\max}$  é o máximo valor de  $\rho$  atingido em sua simulação. Grafique  $\delta$  como função  $\Delta\tau$  e, definindo como uma boa escolha de passo temporal  $\Delta\tau_{\max}$  como sendo aquele tal que  $\delta < 10^{-3}$  para todo  $\Delta\tau < \Delta\tau_{\max}$ , determine  $\Delta\tau_{\max}$  como função de  $a$ . Verifique se  $\Delta\tau_{\max} \propto a^{3/2}$ . Qual a relação deste resultado com a terceira lei de Kepler? Explique.
- (c) Escreva um programa FORTRAN que calcula a posição  $\boldsymbol{\rho}(\tau)$  e velocidade  $\boldsymbol{v}(\tau)$  de um planeta como função do tempo implementando o método de Runge-Kutta em quarta ordem (RK4) por meio das Eqs. (14)-(17).
- (d) Usando  $\Delta\tau_{\max}$  para o planeta Terra encontrado no item 1a, trace num mesmo gráfico  $\rho(\tau)$  calculado pelos métodos de EC e de RK4. Repita essa mesma tarefa para a energia mecânica total.
- (e) (Opcional) Para seu divertimento, considere forças centrais iguais a  $-\rho^{\phi}\hat{\rho}$ , onde  $\phi$  é um expoente. Usando o método RK4, verifique que para  $\phi = 1$  (oscilador harmônico) e  $\phi = -2$  (Kepler) as órbitas limitadas são fechadas (evidentemente, não apenas as circulares).
- (f) (Opcional) Existe alguma órbita ilimitada (onde  $\rho \rightarrow \infty$  para  $\tau \rightarrow \infty$ ) para  $\phi > 0$ ? Existe alguma órbita limitada para  $\phi \leq -3$ ? Faça algumas simulações variando  $\phi$ .
- (g) (Opcional) Compare o método de Euler-Cromer com o de Verlet graficando a energia como função do tempo para algumas simulações.

## 2. Sol, Terra e Júpiter

Utilizando o método RK4, vamos considerar agora o problema no qual temos a Terra, o Sol e Júpiter.<sup>1</sup> As equações de movimento são dadas por

$$\ddot{\boldsymbol{\rho}}_{\odot,x} = \mu_{\oplus} a_{\odot,\oplus,x} + \mu_{\text{J}} a_{\odot,\text{J},x} \quad \text{e} \quad \ddot{\boldsymbol{\rho}}_{\odot,y} = \mu_{\oplus} a_{\odot,\oplus,y} + \mu_{\text{J}} a_{\odot,\text{J},y}, \quad (18)$$

$$\ddot{\boldsymbol{\rho}}_{\oplus,x} = -a_{\odot,\oplus,x} + \mu_{\text{J}} a_{\oplus,\text{J},x} \quad \text{e} \quad \ddot{\boldsymbol{\rho}}_{\oplus,y} = -a_{\odot,\oplus,y} + \mu_{\text{J}} a_{\oplus,\text{J},y}, \quad (19)$$

$$\ddot{\boldsymbol{\rho}}_{\text{J},x} = -a_{\odot,\text{J},x} - \mu_{\oplus} a_{\oplus,\text{J},x} \quad \text{e} \quad \ddot{\boldsymbol{\rho}}_{\text{J},y} = -a_{\odot,\text{J},y} - \mu_{\oplus} a_{\oplus,\text{J},y}, \quad (20)$$

onde

$$a_{\star,\times,\alpha} = -\frac{(\rho_{\star,\alpha} - \rho_{\times,\alpha})}{|\boldsymbol{\rho}_{\star} - \boldsymbol{\rho}_{\times}|^3}, \quad (21)$$

$\mu_{\star} = \frac{M_{\star}}{M_{\odot}}$ , e  $\boldsymbol{\rho}_{\odot}$ ,  $\boldsymbol{\rho}_{\oplus}$  e  $\boldsymbol{\rho}_{\text{J}}$  são as posições do Sol, Terra e Júpiter, respectivamente. [Note que estamos usando as variáveis definidas em (2), por isso  $M_{\odot}$  no denominador de  $\mu_{\star}$ .]

- (a) Escreva explicitamente em seu relatório o análogo das Eqs. 14-17 para o movimento dos 3 corpos celestes das Eq. (18)-(20).

<sup>1</sup> Note pela tabela I que Júpiter é o planeta que mais afeta a Terra.

- (b) Escreva um programa FORTRAN que calcula a órbita dos corpos celestes das Eq. (18)-(20) pelo método de RK4, admitindo como condição inicial  $\rho_{\delta,0} = (1, 0)$ ,  $\mathbf{v}_{\delta,0} = (0, 1)$ ,  $\rho_{\gamma,0} = (5.2, 0)$ ,  $\mathbf{v}_{\delta,0} = (0, \frac{1}{\sqrt{5.2}})$ ,  $\rho_{\odot,0} = -(\mu_{\delta}\rho_{\delta,0} + \mu_{\gamma}\rho_{\gamma,0})$  e  $\mathbf{v}_{\odot,0} = -(\mu_{\delta}\mathbf{v}_{\delta,0} + \mu_{\gamma}\mathbf{v}_{\gamma,0})$ . Grafique  $\rho_{\delta}(\tau)$  para um período de 30 anos e calcule  $\rho_{\delta,\max}/\rho_{\delta,\min}$ . Compare essa razão com aquela esperada pela excentricidade da órbita terrestre. Justifique muito bem sua escolha para o valor de  $\Delta\tau$  para essa tarefa.
- (c) Multiplique agora a massa de Júpiter por 100 e trace num mesmo gráfico a trajetória dos 3 corpos celestes. Discuta sobre a estabilidade do sistema solar.

### 3. Coreografias celestes

Utilizando o método RK4 e as unidades em (2), vamos agora considerar um regime um pouco diferente no problema da mecânica celeste. Estudaremos a órbita de corpos de mesma massa  $M_{\odot}$  que se atraem gravitacionalmente. Nesse caso, é mais conveniente definirmos a origem do sistema de coordenadas sobre o centro de massa (CM) do sistema, pois todas as partículas irão se mover. (Nota: você não precisa calcular a posição do CM.)

- (a) O que faremos aqui é considerar diferentes condições iniciais e estudar a órbita resultante. Inicialmente, vamos estudar uma realização do problema de Lagrange, na qual as três partículas se movem em um círculo sempre mantendo distâncias iguais entre si, formando portanto um triângulo equilátero. As condições iniciais para esse caso são

Partícula	$\rho_{x,0}$	$\rho_{y,0}$	$v_{x,0}$	$v_{y,0}$
1	1.0	0.0	0.0	$v_0$
2	-0.5	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}v_0$	$-\frac{1}{2}v_0$
3	-0.5	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}v_0$	$-\frac{1}{2}v_0$

onde  $v_0 = 3^{-\frac{1}{4}}$ . Mostre que as órbitas dos planetas são, de fato, circulares. Escolha alguns instantes de tempo e mostre como a posição instantânea de cada partícula evolui. Certifique-se de que os planetas sempre estão a uma mesma distância em qualquer instante de tempo.

- (b) Modifique suas condições iniciais para

Partícula	$\rho_{x,0}$	$\rho_{y,0}$	$v_{x,0}$	$v_{y,0}$
1	0.97000436	-0.24308753	0.466203685	0.43236573
2	-0.97000436	0.24308753	0.466203685	0.43236573
3	0	0	-0.93240737	-0.86473146

Calcule e grafique a órbita resultante nesse caso. Escolha alguns instantes de tempo e mostre como a posição instantânea de cada partícula evolui. Essa solução só foi descoberta em 1993 por C. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3675 (1993). Por falta de criatividade, ela é conhecida como “O Oito”.

- (c) Mude agora a posição inicial  $\rho_{x,0}$  da partícula 1 do item 3b para 0.95000436. O que acontece com o Oito?

## Breve discussão sobre a execução dos problemas

### O problema de dois corpos

Considere a energia total de um sistema de 2 partículas interagindo por uma força conservativa dependente apenas da distância entre elas

$$E = \frac{1}{2} (m_1 v_1^2 + m_2 v_2^2) + V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1).$$

Considere agora a seguinte mudança de variáveis:

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M} \text{ e } \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1,$$

onde  $M = m_1 + m_2$ . A coordenada  $\mathbf{R}$  é a conhecida coordenada do centro de massa e a coordenada  $\mathbf{r}$  é chamada de coordenada relativa. A transformação inversa é

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} - \frac{m_2}{M} \mathbf{r} \text{ e } \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} + \frac{m_1}{M} \mathbf{r}.$$

Com essas novas coordenadas, reescrevemos a energia total como

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} \left( m_1 \left( \dot{R}^2 - 2 \frac{m_2}{M} \dot{\mathbf{R}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \frac{m_2^2}{M^2} \dot{r}^2 \right) + m_2 \left( \dot{R}^2 + 2 \frac{m_1}{M} \dot{\mathbf{R}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \frac{m_1^2}{M^2} \dot{r}^2 \right) \right) + V(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{2} M \dot{R}^2 + \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + V(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

onde  $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$  é chamada de massa reduzida. O primeiro termos da energia é simplesmente a energia cinética do centro de massa. O segundo termo é a energia cinética da coordenada relativa e o terceiro termo é a energia potencial que só depende da coordenada relativa. Note que a coordenada do centro de massa e a coordenada relativa são independentes. Ou seja, o centro de massa é livre e, portanto, descreve um movimento uniforme

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_0 + \mathbf{V}_0 t,$$

enquanto a coordenada relativa descreve um movimento determinado pelo “potencial externo” ditado pela lei de Newton

$$\mu \ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r}).$$

Para forças centrais  $V(\mathbf{r}) = V(r)$  ou  $\mathbf{F} = F(r) \hat{r}$ , então a

$$\mu \ddot{\mathbf{r}} = F(r) \hat{r}.$$

Para forças centrais do tipo  $F = -K r^\phi$ , reescrevemos a equação de movimento como

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{d\tau^2} = -r^\phi, \text{ onde } \tau = \sqrt{\frac{K}{\mu}} t.$$

Para o caso gravitacional, isso quer dizer que  $\frac{d^2 \mathbf{r}}{d\tau^2} = -\frac{GM\mu}{r^3} \mathbf{r}$ . Ou seja, a coordenada relativa  $\mathbf{r}$  representa uma partícula de massa  $\mu$  orbitando uma outra partícula de massa  $M$  fixa na origem.

No limite em que  $m_1 \gg m_2$ , como no caso do Sol e um planeta, por exemplo, temos que

$$\mathbf{r}_1 \approx \mathbf{R} \text{ e } \mathbf{r}_2 \approx \mathbf{R} + \mathbf{r}.$$

Tomando o referencial como o do centro de massa, então o Sol fica parado na origem enquanto o planeta  $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$  orbita em torno dele.

### O método de Runge-Kutta

Um importante método de integração numérica de equações diferenciais de primeira ordem é o de Runge-Kutta que explicamos a seguir.

Seja o sistema de equações diferenciais de primeira ordem

$$\frac{dx_\beta}{dt} = f_\beta(x_1, \dots, x_N, t) = f_\beta(\{x_\gamma\}, t), \quad (22)$$

onde  $x_\beta \equiv x_\beta(t)$  são funções do tempo e  $\beta = 1, \dots, N$ . Por exemplo, no caso de uma partícula num potencial externo  $V(\mathbf{r}, t)$  (dependente da posição e do tempo), onde  $\mathbf{r}(t)$  é a posição da mesma no instante  $t$ , tem-se o seguinte sistema

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) = v_x(t), & \Rightarrow \dot{x}_1 = f_1(x_1, \dots, x_6, t) = x_4, \\ \dot{y}(t) = v_y(t), & \Rightarrow \dot{x}_2 = f_2(x_1, \dots, x_6, t) = x_5, \\ \dot{z}(t) = v_z(t), & \Rightarrow \dot{x}_3 = f_3(x_1, \dots, x_6, t) = x_6, \\ \dot{v}_x(t) = -\frac{d}{dx} \left( \frac{V(\mathbf{r}, t)}{m} \right), & \Rightarrow \dot{x}_4 = f_4(x_1, \dots, x_6, t) = -\frac{d}{dx_1} \left( \frac{V(x_1, x_2, x_3, t)}{m} \right), \\ \dot{v}_y(t) = -\frac{d}{dy} \left( \frac{V(\mathbf{r}, t)}{m} \right), & \Rightarrow \dot{x}_5 = f_5(x_1, \dots, x_6, t) = -\frac{d}{dx_2} \left( \frac{V(x_1, x_2, x_3, t)}{m} \right), \\ \dot{v}_z(t) = -\frac{d}{dz} \left( \frac{V(\mathbf{r}, t)}{m} \right), & \Rightarrow \dot{x}_6 = f_6(x_1, \dots, x_6, t) = -\frac{d}{dx_3} \left( \frac{V(x_1, x_2, x_3, t)}{m} \right). \end{aligned}$$

O método diz que uma solução numérica do sistema (22) é dada pela iteração de

$$x_{\beta, k+1} = x_{\beta, k} + \Delta t \sum_{j=1}^m A^{(j)} F_{\beta, k}^{(j)} + \mathcal{O} \left( f_{\beta, k}^{(m)} \Delta t^{m+1} \right). \quad (23)$$

Ou seja, a correção é da ordem de  $\Delta t^{m+1}$  multiplicada pela  $m$ -ésima derivada de  $f_\beta$  no instante  $t = t_k = k\Delta t$ . As funções  $F_{\beta, k}^{(j)}$  dependem das funções em ordem mais baixa:

$$F_{\beta, k}^{(j)} = f_\beta \left( \left\{ x_{\gamma, k} + \frac{\Delta t}{B^{(j)}} F_{\gamma, k}^{(j-1)} \right\}, t_k + \frac{\Delta t}{B^{(j)}} \right), \quad (24)$$

com  $F_{\beta, k}^{(1)} = f_\beta(\{x_{\gamma, k}\}, t_k)$  (o que define  $B^{(1)} \rightarrow \infty$ ). Os coeficientes  $A^{(j)}$  e  $B^{(j)}$  são independentes de  $\beta$  mas dependem da ordem da aproximação  $m$ . Para  $m = 4$ , que é comumente usado, os coeficientes são iguais a

$$2A^{(1)} = 2A^{(4)} = A^{(2)} = A^{(3)} = \frac{1}{3} \text{ e } B^{(2)} = B^{(3)} = 2B^{(4)} = 2. \quad (25)$$

Como pôde o incremento dado em (23) ser de precisão  $f_\beta^{(m)} \Delta t^{m+1}$ ? Note que as funções em (24) são calculadas em tempos intermediárias  $t_k + \frac{\Delta t}{B^{(k)}}$ . Dessa forma, instantes de tempo entre  $t_k$  e  $t_{k+1}$  são considerados. Além disso, note que o método considera as funções  $f_\beta$  calculadas em pontos intermediárias  $x_{\gamma, k} + \frac{\Delta t}{B^{(j)}} F_{\gamma, k}^{(j-1)}$ . Dessa maneira, outras derivadas de  $f_\beta$  estão sendo calculadas pelo método.

Vamos derivar agora os coeficientes  $A^{(j)}$  e  $B^{(j)}$  para ordem  $m = 2$ .

Neste caso, considere a expansão

$$\begin{aligned} x_{\beta, k+1} &= x_{\beta, k} + \frac{dx_{\beta, k}}{dt} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{d^2 x_{\beta, k}}{dt^2} (\Delta t)^2 + \dots \\ &= x_{\beta, k} + f_{\beta, k} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{df_{\beta, k}}{dt} (\Delta t)^2 + \mathcal{O} \left( f_{\beta, k}^{(2)} (\Delta t)^3 \right), \end{aligned}$$

onde usamos que  $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_\beta \frac{\partial x_\beta}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x_\beta} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_\beta f_\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta}$ . Logo,

$$x_{\beta, k+1} = x_{\beta, k} + f_{\beta, k} \Delta t + \frac{1}{2} \left( \partial_t f_{\beta, k} + \sum_\gamma f_{\gamma, k} \partial_\gamma f_{\beta, k} \right) (\Delta t)^2 + \mathcal{O} \left( f_{\beta, k}^{(2)} (\Delta t)^3 \right). \quad (26)$$

Agora comparamos a série de Taylor (26) com a seguinte expressão do método de Runge-Kutta

$$x_{\beta,k+1} = x_{\beta,k} + \Delta t \left( A_{\beta}^{(1)} F_{\beta,k}^{(1)} + A_{\beta}^{(2)} F_{\beta,k}^{(2)} \right) + \mathcal{O} \left( f_{\beta,k}^{(2)} (\Delta t)^3 \right), \quad (27)$$

com

$$F_{\beta,k}^{(1)} = f_{\beta,k} = f_{\beta}(x_{1,k}, \dots, x_{N,k}, t_k) \text{ e } F_{\beta,k}^{(2)} = f_{\beta} \left( \left\{ x_{\gamma,k} + \frac{\Delta t}{B^{(2)}} f_{\gamma,k} \right\}, t_k + \frac{\Delta t}{B^{(2)}} \right).$$

(Note que estamos abrindo a possibilidade de que os coeficientes  $A_{\beta}^{(j)}$  sejam dependentes de  $\beta$ .) Para que possamos comparar (26) com (27), precisamos expandir

$$\begin{aligned} F_{\beta,k}^{(2)} &= f_{\beta} \left( \left\{ x_{\gamma,k} + \frac{\Delta t}{B^{(2)}} f_{\gamma,k} \right\}, t_k + \frac{\Delta t}{B^{(2)}} \right) = f_{\beta}(\{x_{\gamma,k}\}, t_k) + \sum_{\gamma} \partial_{\gamma} f_{\beta,k} \left( \frac{\Delta t}{B^{(2)}} f_{\gamma,k} \right) + \partial_t f_{\beta,k} \left( \frac{\Delta t}{B^{(2)}} \right) + \mathcal{O} \left( f_{\beta}^{(2)} (\Delta t)^2 \right) \\ &= f_{\beta}(\{x_{\gamma,k}\}, t_k) + \frac{\Delta t}{B^{(2)}} \left( \sum_{\gamma} f_{\gamma,k} \partial_{\gamma} + \partial_t \right) f_{\beta,k} + \mathcal{O} \left( f_{\beta}^{(2)} (\Delta t)^2 \right) \\ &= f_{\beta}(\{x_{\gamma,k}\}, t_k) + \frac{\Delta t}{B^{(2)}} \frac{d}{dt} f_{\beta,k} + \mathcal{O} \left( f_{\beta}^{(2)} (\Delta t)^2 \right). \end{aligned}$$

Substituindo esse resultado em (27), então

$$x_{\beta,k+1} = x_{\beta,k} + \Delta t \left( A_{\beta}^{(1)} + A_{\beta}^{(2)} \right) f_{\beta,k} + \frac{A_{\beta}^{(2)}}{B^{(2)}} \left( \frac{d}{dt} f_{\beta,k} \right) (\Delta t)^2 + \mathcal{O} \left( f_{\beta,k}^{(2)} (\Delta t)^3 \right),$$

de onde concluímos que

$$A_{\beta}^{(1)} + A_{\beta}^{(2)} = 1 \text{ and } \frac{A_{\beta}^{(2)}}{B^{(2)}} = \frac{1}{2}. \quad (28)$$

Note que esse sistema tem mais de uma solução. Mais importante, note que os coeficientes  $A_{\beta}^{(j)}$  não dependem de  $\beta$  e, por esse motivo, não vamos mais escrever o sub-índice  $\beta$ .

Como exemplo, considere o caso em que  $\dot{x} = f_x(x, v, t) = v$ , e  $\dot{v} = f_v(x, v, t)$ . Portanto, até segunda ordem

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + \Delta t \left( A^{(1)} v_k + A^{(2)} \left( v_k + \frac{\Delta t}{B^{(2)}} f_{v,k} \right) \right) \\ &= x_k + \Delta t \left( A^{(1)} + A^{(2)} \right) v_k + (\Delta t)^2 \frac{A^{(2)}}{B^{(2)}} f_{v,k} \\ &= x_k + \Delta t v_k + \frac{(\Delta t)^2}{2} f_{v,k}, \end{aligned}$$

para qualquer solução de (28). Note que esta é a equação de movimento de uma partícula com aceleração constante. Ou seja, aprendemos aqui que o método de Runge-Kutta na aproximação de segunda ordem considera o movimento como sendo uniformemente acelerado entre os instantes  $t_k$  e  $t_{k+1}$ . Isso já é uma aproximação melhor do que a do método de Euler, que considera que o movimento é uniforme entre esses instantes de tempo. A atualização para a velocidade é

$$v_{k+1} = v_k + \Delta t \left[ A^{(1)} f_{v,k} + A^{(2)} f_v \left( x_k + \frac{\Delta t}{B^{(2)}} v_k, v_k + \frac{\Delta t}{B^{(2)}} f_{v,k}, t_k + \frac{\Delta t}{B^{(2)}} \right) \right].$$

Para o caso em que  $f_v(x, v, t) = f_v(t)$ , e usando a solução  $A^{(1)} = A^{(2)} = \frac{1}{2}$ , e  $B^{(2)} = 1$ , então

$$v_{k+1} - v_k = \frac{\Delta t}{2} [f_{v,k} + f_v(t_k + \Delta t)] = \frac{\Delta t}{2} [f_{v,k} + f_{v,k+1}],$$

que simplesmente é a regra de integração numérica Trapezoidal.

Em suma, o método de Runge-Kutta é uma maneira de implementar as regras numéricas de integração para sistemas de equações diferenciais.

Em ordem  $m = 3$ , encontramos que

$$\left(A_\beta^{(1)} + A_\beta^{(2)} + A_\beta^{(3)}\right) = 1, \quad \left(\frac{A_\beta^{(2)}}{B^{(2)}} + \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(3)}}\right) = \frac{1}{2!}, \quad \text{e} \quad \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(2)}B^{(3)}} = \frac{1}{3!} = \left(\frac{A_\beta^{(2)}}{2B^{(2)2}} + \frac{A_\beta^{(3)}}{2B^{(3)2}}\right).$$

Novamente, os coeficientes não dependem de  $\beta$ . Como no caso de segunda ordem, há mais de uma solução. Uma delas (talvez uma das mais simples) é tal que  $A_\beta^{(2)} = 0$ . Neste caso,

$$A^{(1)} = \frac{1}{4}, \quad A^{(2)} = 0, \quad A_3^{(3)} = \frac{3}{4}, \quad B^{(2)} = 3, \quad \text{e} \quad B^{(3)} = \frac{3}{2}.$$

Para o caso de quarta ordem  $m = 4$ , após uma tediosa manipulação algébrica, encontramos que

$$A_\beta^{(1)} + \dots + A_\beta^{(4)} = 1, \quad \frac{A_\beta^{(2)}}{B^{(2)}} + \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(3)}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(4)}} = \frac{1}{2}, \quad \frac{A_\beta^{(2)}}{B^{(2)2}} + \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(3)2}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(4)2}} = \frac{1}{3},$$

$$\frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(2)}B^{(3)}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(3)}B^{(4)}} = \frac{1}{3!}, \quad \frac{A_\beta^{(2)}}{B^{(2)3}} + \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(3)3}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(4)3}} = \frac{1}{4}, \quad \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(2)2}B^{(3)}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(3)2}B^{(4)}} = \frac{2!}{4!},$$

$$\frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(2)}B^{(3)2}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(3)}B^{(4)2}} = \frac{3}{4!} \quad \text{and} \quad \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(2)}B^{(3)}B^{(4)}} = \frac{1}{4!}.$$

Novamente, os coeficientes não dependem de  $\beta$ . Entretanto, diferentemente dos casos  $m = 2$  e  $m = 3$ , só há uma solução igual aquela apresentada em (25)

$$2A^{(1)} = 2A^{(4)} = A^{(2)} = A^{(3)} = \frac{1}{3} \quad \text{e} \quad B^{(2)} = B^{(3)} = 2B^{(4)} = 2.$$

Em outras palavras,

$$x_{\beta,k+1} = x_{\beta,k} + \frac{\Delta t}{6} \left( F_{\beta,k}^{(1)} + 2F_{\beta,k}^{(2)} + 2F_{\beta,k}^{(3)} + F_{\beta,k}^{(4)} \right),$$

onde

$$F_{\beta,k}^{(1)} = f_{\beta,k}, \quad F_{\beta,k}^{(2)} = f_\beta \left( \left\{ x_{\gamma,k} + \frac{\Delta t}{2} f_{\gamma,k} \right\}, t_k + \frac{\Delta t}{2} \right),$$

$$F_{\beta,k}^{(3)} = f_\beta \left( \left\{ x_{\gamma,k} + \frac{\Delta t}{2} F_{\gamma,k}^{(2)} \right\}, t_k + \frac{\Delta t}{2} \right) \quad \text{e} \quad F_{\beta,k}^{(4)} = f_\beta \left( \left\{ x_{\gamma,k} + \Delta t F_{\gamma,k}^{(3)} \right\}, t_k + \Delta t \right).$$