

Introdução à Física Computacional - 7600017 - 2S/2023
Projeto 5 — Leis de Kepler e o problema de três corpos
Prazo de entrega: 13/12

DESCRIÇÃO:

O objetivo desse projeto é discutir 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}_k é a posição da k -ésima partícula. Em particular, estaremos interessados na lei de Gravitação de Newton que é um caso específico desse tipo de força:

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

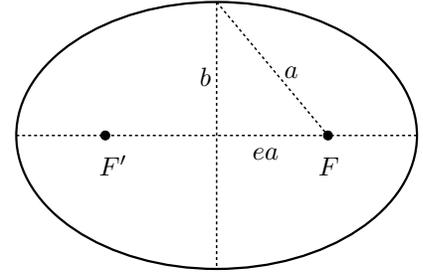
onde m_k é a massa da k -ésima partícula (ou do k -ésimo astro), G é a constante gravitacional e $r = |\mathbf{r}|$ é o módulo do vetor \mathbf{r} . Nesse caso, consideraremos partículas/astros se movendo em um plano, o que é uma excelente aproximação para o sistema solar, ou seja, uma simulação bidimensional será suficiente.

Como a órbita dos planetas é periódica, o método de Euler não é recomendável, visto que ele não conserva energia e leva a órbitas instáveis. Utiliza-se então o método de Euler-Cromer e Verlet. (Os mais entusiastas podem complementar seu estudo utilizando outro método importante de integração numérica: o método de Runge-Kutta.)

Para este projeto, todos os seus programas devem usar precisão real dupla (real*8).

O PROBLEMA DE KEPLER

Desde os trabalhos pioneiros de Kepler, sabe-se que os planetas se movem em órbitas elípticas com o Sol em um dos focos. A figura ao lado ilustra 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. Esse resultado segue triunfalmente da lei da gravitação de Newton na Eq. (1) e um dos objetivos aqui é reimplementar essa solução de modo numérico. Esta tarefa é facilitada estabelecendo unidades mais convenientes para o problema. Por se tratar de um problema astronômico, utiliza-se, não muito surpreendentemente, a chamada Unidade Astronômica (UA) como unidade de 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). Analogamente, o tempo é convenientemente medido em unidades de anos (1 ano $\approx 3.2 \times 10^7$ s), o que corresponde, naturalmente, ao período de rotação da Terra ao redor do Sol. Entretanto, por conveniência, vamos adotar como unidade de tempo o ano dividido por 2π . Para reescrever a lei de Newton nessas unidades, define-se

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

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, usou-se que $GM_{\odot} = 4\pi^2 \text{UA}^3 \text{ano}^{-2}$. Este resultado é obtido da seguinte maneira. Aproximando 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.

Considere o problema de duas “partículas”, planeta + Sol. Pelo fato de a massa do Sol ser muito maior que a massa dos planetas, toma-se o Sol parado na origem: $v_{\odot} = 0$ e $(x_{\odot}, y_{\odot}) = (0, 0)$. As equações de movimento para as coordenadas (x, y) de um dado planeta são

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

onde

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

é a distância instantânea entre o planeta e o Sol em unidades astronômicas. Reescrevendo essas duas equações diferenciais de segunda ordem como quatro equações diferenciais de primeira ordem, tem-se que,

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

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

onde v_x e v_y são, respectivamente, as velocidades ao longo das direções x e y . Pelo 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 **método de Verlet** que usa a ideia de derivadas para frente e pra trás. Sejam as série de Taylor para frente e para trás

$$z(t + \Delta t) = z(t) + \dot{z}(t) \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{z}(t) (\Delta t)^2 + \frac{1}{6} \dddot{z}(t) (\Delta t)^3 + \dots, \quad (14)$$

$$z(t - \Delta t) = z(t) - \dot{z}(t) \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{z}(t) (\Delta t)^2 - \frac{1}{6} \dddot{z}(t) (\Delta t)^3 + \dots \quad (15)$$

Somando as duas equações, temos que $z(t + \Delta t) + z(t - \Delta t) = 2z(t) + \ddot{z}(t) (\Delta t)^2 + \mathcal{O}(\Delta t)^4$. (Note a ordem do erro.) Discretizando essa equação e notando que $m\ddot{z} = F(z)$ é a força total, temos que

$$z_{i+1} = 2z_i - z_{i-1} + \frac{F(z_i)}{m} (\Delta t)^2. \quad (16)$$

O detalhe é que, para inicializar o método, precisa-se de duas posições. Geralmente, o problema é dado em termos da posição inicial z_0 e velocidade inicial \dot{z}_0 . Sendo assim, podemos utilizar do método de Euler para calcular $z_1 = z_0 + \dot{z}_0 \Delta t$. Com z_0 e z_1 , pode-se iterar/iniciar o método de Verlet.

1. Órbitas circulares: comparação entre os métodos de EC e Verlet

- Dado que $\rho_0 = (a, 0)$, onde a é o valor do semieixo maior dado na tabela I. Qual deve ser a velocidade inicial para que a órbita do planeta seja circular? (**Desafio opcional:** Qual deve ser a velocidade inicial para se obter uma elipse com a respectiva excentricidade.)
- Escreva um programa FORTRAN que calcule a posição $\rho(\tau)$ e velocidade $\mathbf{v}(\tau)$ de um planeta como função do tempo implementando o método de EC [por meio das Eqs. (10)-(13)] e Verlet [cujas equações você deve construir nas unidades adimensionais adotadas Eq. (2)].
- Certifique que a órbita permaneça circular após muitas revoluções. Para tal, uma escolha cuidadosa de $\Delta\tau$ é necessária. Determine $\delta = \rho_{\max}/\rho_{\min} - 1$, onde ρ_{\max} é o máximo valor de ρ atingido em sua simulação. Faça o gráfico de δ 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 . Para ambos os métodos, verifique se $\Delta\tau_{\max} \propto a^{3/2}$. Qual a relação deste resultado com a terceira lei de Kepler? Explique.

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.

(d) Compare o método de EC com o de Verlet fazendo um gráfico da energia total como função do tempo.

OBS.: Sua energia deve estar em unidades de $\frac{GM_{\odot}m}{\text{UA}}$, onde m é a massa do planeta. Como ela fica nas unidades adimensionais adotadas?

2. O problema de dois corpos: órbitas limitadas

(a) Utilizando o método de Verlet, execute seu programa para para órbitas não circulares e verifique em que condições as órbitas são fechadas ou não. Verifique no caso das órbitas fechadas as três leis de Kepler:

i. Todos os planetas movem-se em órbitas elípticas tendo o Sol num dos focos.

ii. A linha que une um planeta ao Sol varre áreas iguais em tempos iguais.

iii. Se T é o período da órbita e a o semi-eixo maior da órbita então $\frac{T^2}{a^3}$ é constante para todos os planetas.

(b) (Opcional) Para seu divertimento, considere forças centrais iguais a $-\rho^{\phi}\hat{\rho}$, onde ϕ é um expoente. Verifique que para $\phi = 1$ (oscilador harmônico) e $\phi = -2$ (Kepler) as órbitas limitadas são fechadas (evidentemente, não apenas as circulares).

(c) (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 ϕ .

3. Sol, Terra e Júpiter

Considere agora o problema no qual temos a Terra, o Sol e Júpiter.¹ Novamente, por simplicidade, considere que o Sol está fixo na origem, i.e., $\rho_{\odot}(\tau) = \mathbf{0}$. As equações de movimento são dadas por

$$\ddot{\rho}_{\oplus,x} = a_{\oplus,\odot,x} + \mu_{\text{J}} a_{\oplus,\text{J},x} \quad \text{e} \quad \ddot{\rho}_{\oplus,y} = a_{\oplus,\odot,y} + \mu_{\text{J}} a_{\oplus,\text{J},y}, \quad (17)$$

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

onde

$$a_{\star,\times,\alpha} = -\frac{(\rho_{\star,\alpha} - \rho_{\times,\alpha})}{|\rho_{\star} - \rho_{\times}|^3}, \quad (19)$$

$\alpha = x, y$, $\mu_{\star} = \frac{M_{\star}}{M_{\odot}}$, e ρ_{\odot} , ρ_{\oplus} e ρ_{J} são as posições do Sol, Terra e Júpiter, respectivamente. [Note o uso das variáveis definidas em (2), por isso M_{\odot} no denominador de μ_{\star} .]

(a) Escreva explicitamente em seu relatório as equações para o movimento da Terra e de Júpiter que implementem o método de Verlet. Escreva também o programa FORTRAN associado.

(b) Com o seu programa, e utilizando as condições iniciais do item 1a para a Terra e Júpiter, mostre que agora, diferentemente do problema de dois corpos, a órbita terrestre não é mais periódica. Que distâncias típicas a Terra passa a cada ano de sua posição anterior? Faça o gráfico de $\rho_{\oplus}(\tau)$ para um período de 30 anos e calcule $\rho_{\oplus,\max}/\rho_{\oplus,\min}$. 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.

¹ Note pela tabela I que Júpiter é o planeta que mais afeta a Terra.

- (c) Multiplique agora a massa de Júpiter por 100 e trace num mesmo gráfico a trajetória dos 2 corpos celestes. Discuta sobre a estabilidade do sistema solar.
- (d) A tabela abaixo mostra a posição e velocidade de três objetos no cinturão de asteroides entre Marte e Júpiter. Considere os dados para Júpiter sendo raio 5.2 UA e velocidade 2.755 UA/ano. Como todos esses dados se traduzem para as unidades adimensionais adotadas? Despreze o efeito dos asteroides em Júpiter, e considere apenas o efeito de Júpiter e do Sol sobre os asteroides. Monte as órbitas dos asteroides. Discuta seus resultados. Você já ouviu falar das lacunas de Kirkwood?

Objeto	raio (UA)	velocidade (UA/ano)
Asteroide I	3.000	3.628
Asteroide II	3.276	3.471
Asteroide III	3.700	3.267

- (e) Coloque os planetas todos juntos (no plano) e “brinque” com eles.
- (f) **(Desafio opcional)** Faça um programa que calcule as coordenadas dos planetas ao longo do ano vistas da Terra. Faça um programa que calcule as eclipses lunares e solares.
4. **(Opcional) Coreografias celestes**

Considere agora um regime um pouco diferente no problema da mecânica celeste em que corpos de mesma massa M se atraem gravitacionalmente. Nesse caso, é mais conveniente definir a origem do sistema de coordenadas sobre o centro de massa (CM) do mesmo, pois todas as partículas irão se mover. (Nota: você não precisa calcular a posição do CM.)

- (a) Inicialmente, estude 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 estão na tabela abaixo onde $v_0 = 3^{-\frac{1}{4}}$. Mostre que as órbitas dos planetas são, de fato, circulares. Certifique-se de que as partículas sempre estão a uma mesma distância em qualquer instante de tempo.

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	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}v_0$	$-\frac{1}{2}v_0$

- (b) Modifique suas condições iniciais para aquelas dada pela tabela abaixo. Faça o gráfico a órbita resultante. 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”.

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

- (c) Mude agora a posição inicial $\rho_{x,0}$ da partícula 1 do item 4b 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

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

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 $\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\frac{GM\mu}{r^3} \mathbf{r}$, isso quer dizer que a coordenada relativa \mathbf{r} representa uma partícula de massa μ 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

$$\frac{dx_\beta}{dt} = f_\beta(x_1, \dots, x_N, t) = f_\beta(\{x_\gamma\}, t), \quad (20)$$

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

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

O método diz que uma solução numérica do sistema (20) é dada pela iteração de

$$x_{\beta, k+1} = x_{\beta, k} + \Delta t \sum_{j=1}^m A^{(j)} F_{\beta, k}^{(j)} + \mathcal{O} \left(f_{\beta, k}^{(m)} \Delta t^{m+1} \right). \quad (21)$$

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

$$F_{\beta, k}^{(j)} = f_\beta \left(\left\{ x_{\gamma, k} + \frac{\Delta t}{B^{(j)}} F_{\gamma, k}^{(j-1)} \right\}, t_k + \frac{\Delta t}{B^{(j)}} \right), \quad (22)$$

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 β mas dependem da ordem da aproximação m . Para $m = 4$, que é comumente usado, os coeficientes são iguais a

$$2A^{(1)} = 2A^{(4)} = A^{(2)} = A^{(3)} = \frac{1}{3} \text{ e } B^{(2)} = B^{(3)} = 2B^{(4)} = 2. \quad (23)$$

Como pode o incremento dado em (21) ser de precisão $f_\beta^{(m)} \Delta t^{m+1}$? Note que as funções em (22) 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_β calculadas em pontos intermediárias $x_{\gamma, k} + \frac{\Delta t}{B^{(j)}} F_{\gamma, k}^{(j-1)}$. Dessa maneira, outras derivadas de f_β 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,

$$x_{\beta, k+1} = x_{\beta, k} + f_{\beta, k} \Delta t + \frac{1}{2} \left(\partial_t f_{\beta, k} + \sum_\gamma f_{\gamma, k} \partial_\gamma f_{\beta, k} \right) (\Delta t)^2 + \mathcal{O} \left(f_{\beta, k}^{(2)} (\Delta t)^3 \right). \quad (24)$$

Agora comparamos a série de Taylor (24) com a seguinte expressão do método de Runge-Kutta

$$x_{\beta,k+1} = x_{\beta,k} + \Delta t \left(A_{\beta}^{(1)} F_{\beta,k}^{(1)} + A_{\beta}^{(2)} F_{\beta,k}^{(2)} \right) + \mathcal{O} \left(f_{\beta,k}^{(2)} (\Delta t)^3 \right), \quad (25)$$

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 β .) Para que possamos comparar (24) com (25), 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 (25), 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

$$A_{\beta}^{(1)} + A_{\beta}^{(2)} = 1 \text{ and } \frac{A_{\beta}^{(2)}}{B^{(2)}} = \frac{1}{2}. \quad (26)$$

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

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 (26). 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 β . 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

$$\begin{aligned} A_\beta^{(1)} + \dots + A_\beta^{(4)} &= 1, \quad \frac{A_\beta^{(2)}}{B^{(2)}} + \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(3)}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(4)}} = \frac{1}{2}, \quad \frac{A_\beta^{(2)}}{B^{(2)2}} + \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(3)2}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(4)2}} = \frac{1}{3}, \\ \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(2)}B^{(3)}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(3)}B^{(4)}} &= \frac{1}{3!}, \quad \frac{A_\beta^{(2)}}{B^{(2)3}} + \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(3)3}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(4)3}} = \frac{1}{4}, \quad \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(2)2}B^{(3)}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(3)2}B^{(4)}} = \frac{2!}{4!}, \\ \frac{A_\beta^{(3)}}{B^{(2)}B^{(3)2}} + \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(3)}B^{(4)2}} &= \frac{3}{4!} \quad \text{and} \quad \frac{A_\beta^{(4)}}{B^{(2)}B^{(3)}B^{(4)}} = \frac{1}{4!}. \end{aligned}$$

Novamente, os coeficientes não dependem de β . Entretanto, diferentemente dos casos $m = 2$ e $m = 3$, só há uma solução igual aquela apresentada em (23)

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

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

$$\begin{aligned} F_{\beta,k}^{(1)} &= f_{\beta,k}, \quad F_{\beta,k}^{(2)} = f_\beta \left(\left\{ x_{\gamma,k} + \frac{\Delta t}{2} f_{\gamma,k} \right\}, t_k + \frac{\Delta t}{2} \right), \\ F_{\beta,k}^{(3)} &= f_\beta \left(\left\{ x_{\gamma,k} + \frac{\Delta t}{2} F_{\gamma,k}^{(2)} \right\}, t_k + \frac{\Delta t}{2} \right) \quad \text{e} \quad F_{\beta,k}^{(4)} = f_\beta \left(\left\{ x_{\gamma,k} + \Delta t F_{\gamma,k}^{(3)} \right\}, t_k + \Delta t \right). \end{aligned}$$

Para o caso em questão e em unidades astronômicas, o método em quarta ordem de aproximação em $\Delta\tau$ diz que deve-se iterar as seguintes equações:

$$\rho_{x,i+1} = \rho_{x,i} + \frac{\Delta\tau}{6} \left(F_{1,i}^{(1)} + 2F_{1,i}^{(2)} + 2F_{1,i}^{(3)} + F_{1,i}^{(4)} \right), \quad (27)$$

$$\rho_{y,i+1} = \rho_{y,i} + \frac{\Delta\tau}{6} \left(F_{2,i}^{(1)} + 2F_{2,i}^{(2)} + 2F_{2,i}^{(3)} + F_{2,i}^{(4)} \right), \quad (28)$$

$$v_{x,i+1} = v_{x,i} + \frac{\Delta\tau}{6} \left(F_{3,i}^{(1)} + 2F_{3,i}^{(2)} + 2F_{3,i}^{(3)} + F_{3,i}^{(4)} \right), \quad (29)$$

$$v_{y,i+1} = v_{y,i} + \frac{\Delta\tau}{6} \left(F_{4,i}^{(1)} + 2F_{4,i}^{(2)} + 2F_{4,i}^{(3)} + F_{4,i}^{(4)} \right), \quad (30)$$

onde

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

com

$$\begin{aligned} \rho_{x,i}^{(j)} &= \rho_{x,i} + C^{(j)} \Delta t F_{1,i}^{(j-1)}, \quad \rho_{y,i}^{(j)} = \rho_{y,i} + C^{(j)} \Delta t F_{2,i}^{(j-1)}, \\ v_{x,i}^{(j)} &= v_{x,i} + C^{(j)} \Delta t F_{3,i}^{(j-1)}, \quad \text{e} \quad v_{y,i}^{(j)} = v_{y,i} + C^{(j)} \Delta t F_{4,i}^{(j-1)}, \end{aligned}$$

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 $C^{(1)} = 0$.)