

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO Nº 663

**OBTENÇÃO E ANÁLISE DE MODELOS
DISCRETIZADOS DINAMICAMENTE VÁLIDOS
PARA SISTEMAS CONSERVATIVOS:
DOIS ESTUDOS DE CASO**

Saulo Benchimol Bastos

DATA DA DEFESA: 01/03/2011

Universidade Federal de Minas Gerais

Escola de Engenharia

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica

**OBTENÇÃO E ANÁLISE DE MODELOS DISCRETIZADOS
DINAMICAMENTE VÁLIDOS PARA SISTEMAS
CONSERVATIVOS: DOIS ESTUDOS DE CASO**

Saulo Benchimol Bastos

Dissertação de Mestrado submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Elétrica.

Orientador: Prof. Eduardo Mazoni Andrade Marçal Mendes

Belo Horizonte - MG

Março de 2011

**"Obtenção e Análise de Modelos Discretizados Dinamicamente
Válidos para Sistemas Conservativos: Dois Estudos de Caso"**

Saulo Benchimol Bastos

Dissertação de Mestrado submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Elétrica.

Aprovada em 01 de março de 2011.

Por:



Prof. Dr. Eduardo Mazoni Andrade Marçal Mendes
DELT (UFMG) - Orientador



Prof. Dr. Luis Antonio Aguirre
DELT (UFMG)



Prof. Dr. Ricardo Hiroshi Caldeira Takahashi
DMAT (UFMG)

Dedicatória

Apesar de diversas pessoas não terem ajudado diretamente na elaboração do objeto deste trabalho, certamente tiveram um papel imprescindível para o seu êxito. Portanto, dedico este trabalho a todos vocês que, em algum momento, me ajudaram a ter forças para continuar.

Dedico aos meus pais, Nilson e Grace, pelo apoio e incentivo incondicionais. Sem eles, teria sido impossível ter chegado até aqui.

Dedico ao meu irmão Nélio e a minha irmã Liliane, por trazerem alegria na família. Também a Gabi e Miguel, pelas mesmas razões.

Dedico a Bela, pelo carinho e por estar sempre ao meu lado.

Dedico ao meu orientador Mazoni, pela compreensão e paciência de minha difícil situação nestes últimos anos e por não ter desistido de mim.

Dedico ao Thiago Madureira, pela amizade e por constantemente lembrar a importância de se manter o foco nas metas de vida.

Dedico ao Rafael Melim, pela ajuda com os problemas numéricos de simulações em Fortran.

Dedico a Arlete e Anete do PPGEE da UFMG, pelas enormes ajudas nas matrículas e nos serviços de secretaria.

Dedico ao Javé, por facilitar a conciliação entre o Mestrado e o Banco Central.

Dedico a todas as outras pessoas que, mesmo não tendo sido explicitamente citadas, contribuíram com suas palavras de apoio.

Agradecimentos

Agradeço ao Eduardo Mazoni pelo conhecimento transmitido e pela exímia orientação dada ao longo do desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço também aos professores das disciplinas de Mestrado pelos ensinamentos, especialmente à Luis Aguirre, quem foi responsável por introduzir os conceitos de sistemas dinâmicos não-lineares.

“O objetivo da modelagem é melhorar nossa compreensão do mundo.”

Autor desconhecido.

Conteúdo

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

Lista de Abreviaturas

Lista de Siglas

Lista de Símbolos

Resumo

Abstract

1	Introdução	p. 19
1.1	Motivação	p. 19
1.2	Objetivos	p. 21
1.3	Descrição dos capítulos	p. 22
2	Referencial Teórico	p. 23
2.1	Sistemas conservativos	p. 23
2.1.1	Características gerais	p. 23
2.1.2	Sistemas Hamiltonianos	p. 24
2.1.3	Indicadores de energia em sistemas conservativos	p. 24
2.2	Ferramentas utilizadas para análise de sistemas não-lineares	p. 26
2.2.1	Seção de Poincaré	p. 27

2.2.2	Expoentes de Lyapunov	p. 27
2.2.3	Dimensão de Kaplan-Yorke ou Dimensão de Lyapunov	p. 29
2.3	Implementações	p. 30
2.3.1	Integração numérica	p. 30
2.3.2	Expoentes de Lyapunov para sistemas dinâmicos contínuos	p. 33
2.3.3	Expoentes de Lyapunov para sistemas dinâmicos discretos	p. 34
2.4	Exemplos de Sistemas Conservativos	p. 35
2.4.1	Hénon-Heiles	p. 35
2.4.2	Sprott-Nosé-Hoover	p. 37
2.5	Métodos de discretização	p. 39
2.5.1	Definição geral do modelo discreto	p. 39
2.5.2	Método de discretização proposto por Mickens	p. 40
2.5.3	Proposto por Monaco e Normand-Cyrot	p. 42
2.6	Próximos passos	p. 44
3	Metodologia	p. 45
3.1	Apresentação da metodologia	p. 45
3.2	Considerações sobre os passos necessários para obtenção dos resultados	p. 46
3.2.1	Simulação do sistema contínuo	p. 46
3.2.2	Geração da seção de Poincaré	p. 47
3.2.3	Passo máximo de discretização	p. 49
3.2.4	Expoentes de Lyapunov e dimensão de Kaplan-Yorke	p. 50
3.2.5	Energia em estado estacionário	p. 52
3.2.6	Produto dos autovalores da matriz jacobiana	p. 53
3.2.7	Traço da matriz jacobiana	p. 54
3.2.8	Índices de conservação da energia	p. 54
3.2.9	Gráficos em função do passo de discretização	p. 55

4	Resultados	p. 56
4.1	Sistema Hénon-Heiles	p. 56
4.1.1	Definição do nível de energia e da condição inicial	p. 56
4.1.2	Seção de Poincaré característica do sistema contínuo	p. 56
4.1.3	Análise da frequência do sistema contínuo	p. 57
4.1.4	Expoentes de Lyapunov e Dimensão de Kaplan-Yorke	p. 57
4.1.5	Modelo discretizado pelo método de Mickens	p. 59
4.1.6	Modelo discretizado de ordem 3 pelo método de Monaco e Normand-Cyrot	p. 65
4.1.7	Modelo discretizado pelo método de Monaco e Normand-Cyrot com escolha de termos	p. 71
4.1.8	Modelo discretizado de ordem 9 pelo método de Monaco e Normand-Cyrot	p. 73
4.1.9	Comparação entre os métodos e comentários adicionais	p. 83
4.2	Sistema Sprott-Nosé-Hoover	p. 89
4.2.1	Definição do nível de energia e da condição inicial	p. 89
4.2.2	Seção de Poincaré característica do sistema contínuo	p. 89
4.2.3	Análise da frequência do sistema contínuo	p. 89
4.2.4	Expoentes de Lyapunov e Dimensão de Kaplan-Yorke	p. 90
4.2.5	Modelo discretizado pelo método de Mickens	p. 92
4.2.6	Modelo discretizado de ordem 3 pelo método de Monaco e Normand-Cyrot	p. 95
4.2.7	Modelo discretizado de ordem 8 pelo método de Monaco e Normand-Cyrot	p. 103
4.2.8	Comparação entre os métodos e comentários adicionais	p. 112
4.3	Considerações sobre a simpleticidade do método proposto por Monaco e Normand-Cyrot	p. 114

5 Conclusão	p. 116
5.1 Objetivos principais atingidos com o trabalho	p. 116
5.2 Principais contribuições	p. 117
5.3 Trabalhos aceitos e publicados	p. 120
5.4 Trabalhos futuros	p. 120
Bibliografia	p. 122
Anexo A – Implementação em Matlab do método de integração numé- rica simplético	p. 128

Lista de Figuras

1	Seção de Poincaré e mapa de Poincaré	p. 27
2	Potencial do sistema Hénon-Heiles	p. 37
3	Seção de Poincaré do sistema Hénon-Heiles contínuo	p. 57
4	Frequências da variável x do sistema Hénon-Heiles contínuo	p. 58
5	Seção de Poincaré do sistema Hénon-Heiles usando o modelo discretizado pelo método proposto por Mickens	p. 60
6	Energia em estado estacionário da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 61
7	Produto dos autovalores da matriz jacobiana da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 62
8	Índice \mathcal{H}_1 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 63
9	Índice \mathcal{H}_2 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 63
10	Seção de Poincaré do sistema Hénon-Heiles usando o modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$	p. 66
11	Energia em estado estacionário da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 66
12	Produto dos autovalores da matriz jacobiana da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 67

13	Índice \mathcal{H}_1 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 68
14	Índice \mathcal{H}_2 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 69
15	Somatório dos expoentes de Lyapunov para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 70
16	Dimensão de Kaplan-Yorke para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 70
17	Corte em $v_k = 0$ da seção de Poincaré para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 74
18	Corte em $y_k = 0$ da seção de Poincaré para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 75
19	Energia em estado estacionário da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 75
20	Produto dos autovalores da matriz jacobiana da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 76
21	Seção de Poincaré do sistema Hénon-Heiles usando o modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$	p. 77
22	Índice \mathcal{H}_1 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 78
23	Índice \mathcal{H}_2 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 79

24	Frequências da variável x do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles	p. 80
25	Somatório dos expoentes de Lyapunov para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 82
26	Dimensão de Kaplan-Yorke para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h	p. 82
27	Seção de Poincaré do sistema Hénon-Heiles usando o modelo discretizado pelo método híbrido, Mickens e termos de 7 a 9 de Monaco e Normand-Cyrot	p. 88
28	Seção de Poincaré do sistema Sprott-Nosé-Hoover contínuo	p. 90
29	Frequências da variável y do sistema Sprott-Nosé-Hoover contínuo	p. 91
30	Seção de Poincaré do sistema Sprott-Nosé-Hoover usando o modelo 1 discretizado pelo método proposto por Mickens	p. 93
31	Seção de Poincaré do sistema Sprott-Nosé-Hoover usando o modelo 2 discretizado pelo método proposto por Mickens	p. 95
32	Seção de Poincaré do sistema Sprott-Nosé-Hoover usando o modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$	p. 96
33	Corte em $x_k = 0$ da seção de Poincaré para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 97
34	Energia em estado estacionário da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 97
35	Índice \mathcal{H}_2 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 98

36	Energia H_1 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 99
37	Produto dos autovalores da matriz jacobiana da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 99
38	Somatório dos expoentes de Lyapunov para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 102
39	Seção de Poincaré do sistema Sprott-Nosé-Hoover usando o modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$	p. 104
40	Corte em $x_k = 0$ da seção de Poincaré para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 105
41	Energia em estado estacionário da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 105
42	Energia H_1 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 106
43	Produto dos autovalores da matriz jacobiana da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 107
44	Índice \mathcal{H}_1 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 107
45	Índice \mathcal{H}_2 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 108

46	Frequências da variável y do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover	p. 109
47	Somatório dos expoentes de Lyapunov para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h	p. 112

Lista de Tabelas

- 1 Energia H , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles. p. 62
- 2 Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles. p. 64
- 3 Energia H , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 3 do sistema Hénon-Heiles. p. 68
- 4 Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 3 do sistema Hénon-Heiles. p. 71
- 5 Acréscimos no traço da matriz jacobiana, dado pela eq. (3.22), para o sistema Hénon-Heiles p. 72
- 6 Energia H , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot com termos escolhidos (ordem 7, sem os termos de ordem 4 e 5) do sistema Hénon-Heiles. p. 73
- 7 Energia H , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 9 do sistema Hénon-Heiles. p. 81
- 8 Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 9 do sistema Hénon-Heiles. p. 83

9	Média da energia μ_H e percentual $\frac{\mu_H}{H_0}$, sendo H_0 a energia do sistema contínuo original dada pela eq. (4.2), do sistema Hénon-Heiles para os métodos de discretização proposto por Mickens e por Monaco e Normand-Cyrot de ordem 3, com escolha de termos, e de ordem 9.	p. 84
10	Média do produto dos autovalores da matriz jacobiana $\mu_{\mathcal{L}}$ do sistema Hénon-Heiles para os métodos de discretização proposto por Mickens e por Monaco e Normand-Cyrot de ordem 3, com escolha de termos, e de ordem 9.	p. 84
11	Índice $\mu_{\mathcal{H}_2}$ do sistema Hénon-Heiles para os métodos de discretização proposto por Mickens e por Monaco e Normand-Cyrot de ordem 3, com escolha de termos, e de ordem 9.	p. 85
12	Índice de simetria \mathcal{S} e somatório \mathcal{V} dos expoentes de Lyapunov do sistema Hénon-Heiles para os métodos de discretização proposto por Mickens e por Monaco e Normand-Cyrot de ordem 3 e de ordem 9.	p. 85
13	Energia H , energia para um grupos de termos H_1 , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} , e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Mickens do sistema Sprott-Nosé-Hoover.	p. 92
14	Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Mickens do sistema Sprott-Nosé-Hoover.	p. 94
15	Energia H , energia para um grupos de termos H_1 , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} , e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 3 do sistema Sprott-Nosé-Hoover.	p. 100
16	Expoentes de Lyapunov, somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 3 do sistema Sprott-Nosé-Hoover.	p. 101

- 17 Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 3 do sistema termostático Nosé-Hoover. . . p. 102
- 18 Energia H , energia para um grupos de termos H_1 , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} , e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 8 do sistema Sprott-Nosé-Hoover. p. 110
- 19 Expoentes de Lyapunov, somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 8 do sistema Sprott-Nosé-Hoover. p. 111
- 20 Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 8 do sistema termostático Nosé-Hoover. . . p. 113

Lista de Abreviaturas

s segundo(s);

Hz hertz.

Lista de Siglas

NH	Nosé-Hoover;
SNH	Sprott-Nosé-Hoover;
MNC	Monaco e Normand-Cyrot;
RK	Runge-Kutta;
GS	Gram-Schmidt;
MGS	Gram-Schmidt modificado;
RGS	Gram-Schmidt reortogonalizado;
HQR	Fatoração QR que utiliza a transformação de <i>Householder</i> ;

Lista de Símbolos

\dot{x}	Derivada primeira de x com relação ao tempo, $\frac{dx}{dt}$;
x_k	Modelo discretizado a partir de \dot{x} no instante k ;
\mathbb{R}	Espaço dos números reais;
I_m	Matriz identidade de ordem m ;
$O_{m,n}$	Matriz nula (com todos os elementos iguais a 0) com m linhas e n colunas;
J	Matriz jacobiana;
J_k	Matriz jacobiana do modelo discretizado
J_k^η	Matriz jacobiana do modelo discretizado de ordem η pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot
$H(\cdot)$	Função Hamiltoniana;
$\mathcal{O}(h^n)$	Função polinomial de h de ordem n sem o termo constante, ou seja, função polinomial com termos de h a h^n
$\det(\cdot)$	Determinante de uma matriz;
$\text{tr}(\cdot)$	Traço de uma matriz;
$ \cdot $	Norma ℓ_1 ;
γ_i	Autovalor i de uma matriz;
λ_i	Expoente de Lyapunov i ;
ω	Frequência angular (rad/s);
\wedge	Operador lógico E;
\vee	Operador lógico OU.

Resumo

Um problema comum na obtenção da solução numérica de sistemas conservativos é a perda de simetria e perda de energia. Existem métodos de integração numérica que conseguem contornar tais problemas. Porém, pouca atenção é dada a métodos de discretização, que, além de conseguir fornecer uma solução válida, podem gerar também modelos que podem ser usados para análise, modelagem e controle.

Este trabalho tem o objetivo principal de encontrar e analisar modelos discretizados válidos, obtidos por meio de métodos de discretização, para sistemas conservativos que forneçam o mesmo comportamento das equações diferenciais do sistema contínuo e mantenham a simetria e a energia do sistema original à medida que o passo da discretização aumenta.

Dois métodos de discretização são investigados e usados para gerar modelos discretizados de sistemas conservativos. Analisa-se cada modelo discretizado levando em consideração a conservação da energia e simetria, contrapondo com o incremento do passo da discretização. Alguns invariantes dinâmicos, como o espectro de Lyapunov, também são mostrados. Resultados mostram que é possível manter a estabilidade e a simetria, típica de sistema conservativos contínuos, mesmo para valores elevados do passo da discretização.

Abstract

When dealing with the solution of conservative nonlinear differential equations, several problems such as energy loss and symmetry break can occur. In order to avoid such problems as much as possible, several numerical integration methods can be found in the literature. Although the primary objective of these methods is the solution itself, a possible and interesting by-product is a difference equation (a discretized model) that hopefully reproduces the same behavior as the one generated by the original differential equations. Discretization methods, not only provide discretized models which may result in valid solutions, but also give the possibility to use models for analysis, modelling and control.

The purpose of this work is to find and analyse valid discretized models using several discretization schemes for conservative systems. These discretized models must exhibit the same behavior as the original counterpart and therefore conserve the energy and symmetry of the solution even for large discretization steps.

In order to obtain dynamically valid models, two discretization methods are investigated and used to generate conservative discretized models. For each model, energy and symmetry are analysed simultaneously to the increase of the discretization step. Dynamical invariants, such as the Lyapunov exponents, are also shown. Results show that is possible to maintain the stability and the symmetry, characteristic of conservative continuous systems, even for higher discretization steps.

1 *Introdução*

1.1 *Motivação*

Equações diferenciais, lineares ou não-lineares, são objeto de estudo de grande interesse em diversas áreas uma vez que são largamente utilizadas para representar, por meio de modelos, sistemas dinâmicos reais (AGUIRRE, 2004). Muitas vezes, não existem soluções analíticas para o conjunto de equações diferenciais e, portanto, deve-se recorrer a um método numérico.

Neste contexto, os sistemas dinâmicos (e conseqüentemente suas representações) podem ser classificados como conservativos, dissipativos ou expansivos. Os conservativos conseguem manter o nível de energia inicial durante toda a solução. Os dissipativos e os expansivos diminuem e aumentam, respectivamente, o nível da energia inicialmente estipulado. Uma outra característica de um sistema conservativo é a sua simetria espacial. Existem diversos problemas nas soluções numéricas de sistemas conservativos ligados à não conservação da simetria, bem como à não conservação da energia. Tais problemas são conhecidos e podem ser contornados com a utilização de métodos de integração simpléticos¹, cuja solução consegue conservar o volume (e conseqüentemente conservar a energia) para sistemas conservativos, como os descritos em (CHANNEL; SCOVEL, 1990; MARKIEWICZ, 1999; HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006).

O objetivo principal de grande parte dos trabalhos disponíveis na literatura - como, por exemplo, as citações em (HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006) - é a utilização de métodos numéricos para obter uma solução para a integração numérica de sistemas conservativos. Normalmente, métodos de integração numérica geram equações de diferença intermediárias, que são usadas para a obtenção da solução numérica. Poucos trabalhos consideram estas equações de diferenças como um modelo discretizado que pode ser ana-

¹Métodos de integração simpléticos utilizam transformações simpléticas para encontrar a solução de equações diferenciais. Estas transformações fazem um mapeamento do fluxo e conseguem preservar a área ao longo da solução.

lisado e utilizado em diversas outras aplicações.

Um método de discretização converte um modelo contínuo, descrito por um conjunto de equações diferenciais, em um modelo discretizado, descrito por um conjunto de equações de diferenças. Existem diversos métodos de discretização, como o proposto por Mickens e o proposto por Monaco e Normand-Cyrot, ambos explorados neste trabalho. Mickens descreve alguns passos para transformar um conjunto de equações diferenciais em um conjunto de equações de diferenças. Monaco e Norman-Cyrot propõe a obtenção das equações de diferenças por meio da aproximação do fluxo gerado pela solução das equações diferenciais usando a derivada de Lie.

Trabalhos publicados mostram que, para sistemas dissipativos, é possível obter equações de diferenças que conseguem descrever o mesmo comportamento do sistema contínuo original (LETELLIER; MENDES, 2004, 2005). Porém, estes métodos de discretização ainda podem falhar em simulações de sistemas conservativos. À medida que o passo de discretização é aumentado, instabilidades numéricas começam a ocorrer, perdendo-se a energia e a simetria, característica de sistemas conservativos, como constatado em (LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007).

Neste trabalho, procura-se utilizar métodos de discretização não como apenas um método numérico para obtenção de uma solução para um conjunto de equações diferenciais, mas como uma ferramenta capaz de fornecer modelos discretizados válidos que consigam reproduzir o mesmo comportamento do sistema conservativo original. A obtenção e análise do modelo é tão importante quanto a própria solução.

A análise do modelo discretizado requer a utilização de indicadores que permitam inferir sobre a qualidade do modelo, comparar modelos, e informar se características do sistema contínuo original permanecem com o incremento do passo de discretização. No caso de sistemas conservativos, os indicadores são voltados para a conservação da energia.

O primeiro indicador da conservação da energia é, naturalmente, a própria energia. Existe um tipo de sistema conservativo, sistema hamiltoniano, que é descrito por uma função, chamada função hamiltoniana, que corresponde à energia do sistema e da qual são derivadas as equações diferenciais. Como existe uma função explícita da energia, esta pode ser usada como um indicador para avaliar a conservação da energia para cada modelo discretizado.

No caso de não haver uma função explícita para a energia, existem ainda outros indicadores possíveis, como, por exemplo, o somatório dos expoentes de Lyapunov, que

indica que a energia é conservada se o seu somatório é igual a zero. Portanto, modelos que conseguem ter um comportamento mais próximo do sistema contínuo devem ter este indicador mais próximo de zero. A distância do zero pode dar indícios sobre a qualidade do modelo. Expoentes de Lyapunov também são muito estudados na área de sistemas conservativos hamiltonianos, pois eles exibem algumas propriedades interessantes, como a simetria (RAMASWAMY, 2002; VALLEJO; AGUIRRE; SANJUÁN, 2003; BESSA, 2005).

A semelhança do modelo discreto com o sistema contínuo original requer que aquele apresente tanto o mesmo comportamento dinâmico do sistema original, quanto as mesmas características, como a manutenção da energia e da simetria espacial e a localização dos pontos-fixos. Diversas dificuldades práticas surgem ao se tentar encontrar modelos discretos utilizando técnicas de identificação de sistemas que consigam atender tais critérios com passos de discretização elevados. Por exemplo, ao impor restrições no cálculo dos parâmetros do modelo discreto, de forma que o mesmo mantenha a energia para passos elevados, o modelo pode se tornar instável, e, ao relaxar as restrições e buscar os parâmetros livremente, pode não ser possível obter um modelo válido com a manutenção da energia e com a mesma localização dos pontos-fixos do sistema original (MENDES, 2011). Surge assim a necessidade de se encontrar modelos discretos válidos que mantenham as mesmas características do sistema contínuo original para passos elevados, os quais podem ser usados em diversas aplicações, tais como a modelagem a partir de dados reais que foram amostrados com um período de amostragem elevado, sistemas de tempo real que necessitem fazer previsões longas.

Uma vez que se tenha modelos válidos que consigam reproduzir o mesmo comportamento dos sistemas contínuos originais, mesmo que estes estejam em regime caótico e que estejam amostrados com um período elevado, pode-se pensar em sua aplicação em outras áreas de conhecimento, como, por exemplo, no controle de sistemas dinâmicos, predição e simulação.

1.2 Objetivos

- Objetivo (principal): encontrar e analisar modelos discretizados, descritos por um conjunto de equações de diferenças, obtidos por meio de métodos de discretização, para sistemas conservativos com as suas devidas particularidades, que tenham o mesmo comportamento das equações diferenciais do sistema contínuo e evitem os problemas de perda de simetria e perda de energia à medida que o passo da discretização aumenta.

- Objetivos específicos:
 - estudar a conservação de energia em sistemas conservativos;
 - estudar indicadores de conservação de energia;
 - estudar ferramentas e implementações que podem ser usados no contexto deste trabalho;
 - estudar métodos de discretização;
 - simular modelos discretizados obtidos por meio de métodos de discretização sobre sistemas conservativos;
 - analisar e comparar modelos discretizados.

1.3 Descrição dos capítulos

O referencial teórico encontra-se no capítulo 2, o qual trata brevemente sobre o que são sistemas conservativos, formas de caracterizá-los e alguns exemplos utilizados na literatura, além de apresentar também ferramentas e implementações usadas neste trabalho e alguns métodos de discretização.

O capítulo 3 contém a metodologia utilizada para a obtenção dos resultados, explicando os passos que serão seguidos para a obtenção dos resultados e, inclusive, definindo alguns critérios para fins de comparação e análise.

Uma vez tendo dado ao leitor um embasamento teórico mínimo sobre os temas principais abordados nesta dissertação (capítulo 2 - Referencial Teórico), e definido os passos que serão executados para se atingir aos objetivos do trabalho (capítulo 3 - Metodologia), apresenta-se os resultados no capítulo 4. O capítulo 4 (Resultados) apresenta os diversos modelos discretizados obtidos a partir da aplicação dos métodos de discretização, e os analisa sob o prisma das ferramentas e indicadores definidos no capítulo 3 (Metodologia).

E, finalmente, conclusões e propostas de trabalhos futuros são resumidos no capítulo 5.

2 Referencial Teórico

2.1 Sistemas conservativos

Sistemas conservativos fazem parte do objeto deste trabalho. Portanto, é essencial definir algumas características gerais que os diferenciam de outros sistemas, conforme exposto na seção 2.1.1.

Existe ainda uma classe especial de sistemas conservativos, chamados de sistemas Hamiltonianos, que serão usados nos exemplos e, portanto, necessitam também de breves explicações (seção 2.1.2).

É imprescindível também definir formas se de mensurar se um sistema dinâmico é conservativo ou não. Neste trabalho, isto é conseguido por meio de indicadores. A seção 2.1.3 apresenta indicadores para sistemas contínuos e discretos. Estes indicadores serão usados tanto para a formulação de novos indicadores (capítulo 3 - Metodologia), quanto para as análises dos resultados (capítulo 4 - Resultados).

2.1.1 Características gerais

Considere o sistema dinâmico:

$$\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}) \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{x}_{n \times 1} = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ são as variáveis de estado, $f(\cdot)$ é o campo vetorial de dimensão apropriada. A derivada de \mathbf{x} com relação ao tempo é dada por $\dot{\mathbf{x}}$.

Sistemas que possuem uma função constante $H(\mathbf{x})$ ao longo das trajetórias são chamados de sistemas conservativos (STROGATZ, 2000; ROBINSON, 2004). Ou seja, para qualquer solução $\mathbf{x}(t)$ com condição inicial $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}^0$, existe uma função que satisfaz $H(\mathbf{x}(t)) = H(\mathbf{x}^0)$ para todo t em que a solução esteja definida (HALE; KOÇAK, 1991). Desta forma, para se ter esta quantia conservada (ou uma primeira integral), deve-se ter

(HALE; KOÇAK, 1991, p. 195):

$$\dot{H}(\mathbf{x}) = \nabla H(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \frac{\partial H}{\partial x_1}(\mathbf{x}) f_1(\mathbf{x}) + \cdots + \frac{\partial H}{\partial x_n}(\mathbf{x}) f_n(\mathbf{x}) = 0 \quad (2.2)$$

Sistemas conservativos não possuem pontos-fixos atrativos (STROGATZ, 2000, p. 160).

2.1.2 Sistemas Hamiltonianos

Um sistema é chamado de Hamiltoniano com d graus de liberdade se

$$\dot{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{q}} \end{pmatrix} = W^{-1} \nabla H(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}^T \\ +\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}^T \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{p}_{d \times 1} = (p_1, \dots, p_d)^T$, $\mathbf{q}_{d \times 1} = (q_1, \dots, q_d)^T$, $W_{2d \times 2d} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{d,d} & I_d \\ -I_d & \mathbf{0}_{d,d} \end{pmatrix}$, H é uma função $H: \mathbb{R}^{2d} \mapsto \mathbb{R}$ e $n = 2d$ (HALE; KOÇAK, 1991; PERKO, 1996; HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006).

Sistemas Hamiltonianos são conservativos (HALE; KOÇAK, 1991, p. 198), (PERKO, 1996, p. 170) e, portanto, $H(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)) = H(\mathbf{p}^0, \mathbf{q}^0)$. Pode-se chegar a tal conclusão por simples inferência a partir das equações (2.2) e (2.3):

$$\dot{H}(\mathbf{x}) = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \left(-\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \right)^T + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \left(+\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right)^T = 0 \quad (2.4)$$

2.1.3 Indicadores de energia em sistemas conservativos

“O que se faz é o que se pode medir” (CHIAVENATO, 2003, p. 457). Uma medição é um processo feito com critérios objetivos que permite quantificar uma grandeza. Um indicador é um valor, obtido por meio de uma medição, com um objetivo específico, ou seja, com o qual se espera um resultado que pode ser analisado.

Existem alguns indicadores que permitem detectar a conservação da energia em um sistema. Inicialmente, serão apresentados os mais comuns para sistemas contínuos. Em seguida, serão descritos os análogos para sistemas discretos.

Sistemas contínuos

Alguns indicadores de conservação da energia usados para sistemas contínuos são:

1. Volume (MONTEIRO, 2006, p. 69-71);
2. Expoentes de Lyapunov (FIEDLER-FERRARA; PRADO, 1994; STROGATZ, 2000; ROBINSON, 2004; MONTEIRO, 2006);

O volume pode ser calculado por meio do divergente da seguinte forma (MONTEIRO, 2006):

$$V = \nabla \cdot \mathbf{f} = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f_2}{\partial x_2} + \dots + \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \quad (2.5)$$

podendo resultar nas seguintes situações:

1. $V = 0 \Rightarrow$ Sistema conservativo
2. $V < 0 \Rightarrow$ Sistema dissipativo
3. $V > 0 \Rightarrow$ Sistema expansivo

O somatório dos expoentes de Lyapunov fornece a taxa de crescimento do volume (ROBINSON, 2004, p.275). Portanto, como constatado em (FIEDLER-FERRARA; PRADO, 1994, p. 141) e (MONTEIRO, 2006, p. 424), duas situações para este indicador são:

1. $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0 \Rightarrow$ Sistema conservativo
2. $\sum_{i=1}^n \lambda_i < 0 \Rightarrow$ Contração do volume no espaço, sistema dissipativo
3. $\sum_{i=1}^n \lambda_i > 0 \Rightarrow$ Aumento do volume no espaço, sistema expansivo

Ressalta-se, ainda, que sistemas conservativos hamiltonianos possuem expoentes de Lyapunov simétricos (BESSA, 2005). Os expoentes formam pares, tais que sua soma é igual a zero, ou seja, $\lambda_i = -\lambda_{n+1-i}$ para $(i = 1, \dots, n)$ (RAMASWAMY, 2002; VALLEJO; AGUIRRE; SANJUÁN, 2003).

Sistemas discretos

O primeiro indicador para a conservação da energia é dado pela própria função Hamiltoniana. Como a energia se conserva, ela não deve mudar de um instante discreto k para um instante $k + 1$. Esta conservação de energia, como observado em (LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007), mas também inferido a partir de (MONACO; NORMAND-CYROT; TIEFENSEE, 2009), pode ser verificada por:

$$H(x_{k+1}) - H(x_k) = 0 \quad (2.6)$$

Um outro indicador para a conservação da energia é dado pela matriz jacobiana do sistema discreto. Egger (1996) e Monteiro (2006, p. 450) concluem que, para a conservação do volume em sistemas discretos, deve-se ter:

$$\mathcal{D}(\mathbf{x}_k) = |\det(J_k)| = 1 \quad (2.7)$$

onde J_k é a matriz jacobiana do sistema discreto em um dado instante k , ou então deve-se ter:

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}_k) = \prod_{s=1}^n \gamma_s^k = 1 \quad (2.8)$$

onde γ_s^k é um autovalor da matriz jacobiana J_k em um instante k . A conservação da energia de um modelo discretizado é assumida se as condições dadas por $\mathcal{D}(\mathbf{x}_k)$ e $\mathcal{L}(\mathbf{x}_k)$ se mantiverem ergoticamente ao longo da trajetória.

Letellier, Mendes e Mickens (2007) e Bastos e Mendes (2010b) fazem uma análise similar ao produto dos autovalores baseada no traço:

$$tr\{J_k\} = m + \mathcal{O}(h) \approx m \quad (2.9)$$

sendo $\mathcal{O}(h)$ uma função do passo de discretização que depende do modelo discretizado utilizado. Se o modelo discretizado possuir traço praticamente igual a dimensão do sistema, a energia é conservada e, portanto, aproximadamente constante para valores de h pequenos.

2.2 Ferramentas utilizadas para análise de sistemas não-lineares

Uma característica de sistemas conservativos é a simetria. Uma ferramenta muito utilizada para análise de sistemas não-lineares para facilitar a visualização da estrutura dos atratores, e conseqüentemente detectar esta característica, é a seção de Poincaré. A seção 2.2.1 desta dissertação dá uma ideia sobre esta técnica, que será muito usada ao se analisar os resultados no capítulo 4. A forma como ela foi implementada é apresentada no capítulo 3 - Metodologia (seção 3.2.2).

As seções seguintes discutem aspectos teóricos sobre expoentes de Lyapunov (seção 2.2.2) e dimensão de Kaplan-Yorke (seção 2.2.3). O somatório dos expoentes de Lyapunov é um indicador da conservação da energia, pois, se for igual a zero, o sistema é conservativo.

Tal fato será usado nas análises dos resultados no capítulo 4. A dimensão de Kaplan-Yorke, apesar de não fornecer diretamente a informação sobre a conservação da energia, consegue dar indícios sobre a qualidade do modelo discretizado.

2.2.1 Seção de Poincaré

Considere o sistema dinâmico n -dimensional definido pela eq. (2.1), cuja solução $\mathbf{x} = \phi_t(\mathbf{x}_0)$ resulta no fluxo contínuo representado pela órbita Γ (Figura 1). A seção de Poincaré é a hipersuperfície $S \in \mathbb{R}^n$ de dimensão $n - 1$ de tal maneira que o fluxo seja transversal a S (PERKO, 1996; FIEDLER-FERRARA; PRADO, 1994; STROGATZ, 2000).

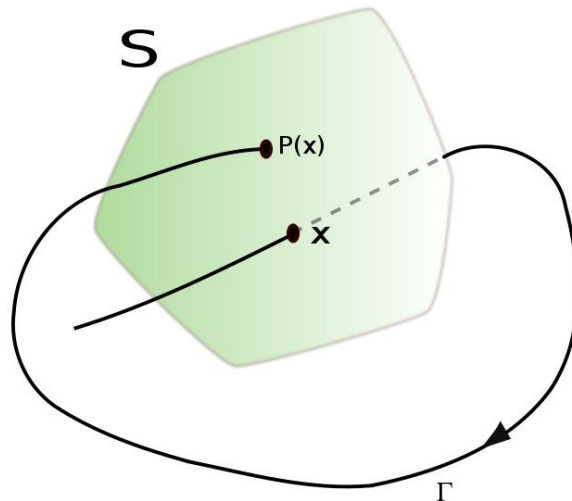


Figura 1: Seção de Poincaré S e mapa de Poincaré $P(x)$. Fonte: (WIKIPEDIA, 2010)

Sendo $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ normal à hipersuperfície S no ponto \mathbf{x} , deve-se satisfazer a condição de transversalidade $\mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \neq 0$ para todo $\mathbf{x} \in S$ (FIEDLER-FERRARA; PRADO, 1994). A seção de Poincaré também demanda que seja satisfeita uma condição de orientação, que define a direção de perfuração da seção. Assim, o ponto \mathbf{x} do fluxo que corta a seção S deve satisfazer apenas uma das seguintes condições: $\mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) > 0$ ou $\mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) < 0$.

2.2.2 Expoentes de Lyapunov

Expoentes de Lyapunov servem para medir a taxa de divergência das trajetórias do sistema (2.1) e, portanto, quantificar a dependência às condições iniciais (FIEDLER-

FERRARA; PRADO, 1994; STROGATZ, 2000; MONTEIRO, 2006).

Considere uma hiper-esfera de condições iniciais centradas em $\mathbf{x}(t_0)$ com raio igual a $\varepsilon(\mathbf{x}_0)$. Com o passar do tempo, o fluxo deforma a hiper-esfera, deixando os seus eixos principais iguais a $\varepsilon_k(t)$, $k = 1, 2, \dots, n$. O expoente de Lyapunov λ_i mede o crescimento (ou encolhimento) exponencial de um eixo principal $\varepsilon_k(t)$ e é definido por:

$$\lambda_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon_0(\mathbf{x}_0) \rightarrow 0} \frac{1}{t} \ln \frac{\varepsilon_i(t)}{\varepsilon_0(x_0)} \quad (2.10)$$

Em geral, os λ_i dependem do estado inicial \mathbf{x}_0 , mas em muitos casos eles são constantes ao longo de uma significativa região no espaço de fases. Da eq. (2.10) e assumindo linearidade, conclui-se que $\varepsilon_i(t) \sim \varepsilon_0(\mathbf{x}_0)e^{\lambda_i t}$.

Assim, no instante t , o hiper-volume no espaço de fases é igual a:

$$V(t) = \prod_{i=1}^n \varepsilon_i(t) = V(t_0) e^{t \sum_{i=1}^n \lambda_i} \quad (2.11)$$

Portanto, como introduzido na seção 2.1.3, se $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0$, o volume se conserva e o sistema é conservativo. Se $\sum_{i=1}^n \lambda_i < 0$, o volume se contrai e o sistema é dissipativo.

Para uma solução caótica em sistemas dissipativos contínuos, deve-se ter pelo menos um expoente $\lambda_i > 0$, $\sum_{i=1}^n \lambda_i < 0$ para garantir a contração do volume no espaço e dimensão no espaço de fases $n \geq 3$ (FIEDLER-FERRARA; PRADO, 1994). Para uma solução periódica ou quasi-periódica, deve-se ter $\lambda_i < 0$ nas direções perpendiculares ao movimento e $\lambda_i = 0$ ao longo da trajetória.

Um expoente de Lyapunov global é dado pela definição da eq. (2.10) e corresponde a evolução no tempo da distância $\varepsilon_i(t)$ quando $t \rightarrow \infty$. Expoente de Lyapunov local, muito usado para estudar sistemas Hamiltonianos, é definido por:

$$\lambda_i(t) = \frac{1}{t} \lim \ln \frac{\varepsilon_i(t)}{\varepsilon_0(x_0)} \quad (2.12)$$

Sistemas conservativos hamiltonianos exibem simetria nos expoentes de Lyapunov, tanto globalmente, quanto localmente em qualquer instante t , ou seja, $\lambda_i(t) = -\lambda_{n+1-i}(t)$, $i = (1, \dots, n)$, $\forall t$ (RAMASWAMY, 2002; VALLEJO; AGUIRRE; SANJUÁN, 2003; BESSA, 2005). Sistemas em dinâmica não-caótica possuem todos os expoentes de Lyapunov globais iguais a zero, que somente é possível devido ao cancelamento dos expoentes locais $\lambda_i(\tau) = -\lambda_i(\tau')$ em algum tempo τ, τ' . Em sistemas conservativos com dinâmica caótica, pelo menos um par de expoente é globalmente diferente de zero (RAMASWAMY, 2002).

Para o caso unidimensional de sistemas discretos, o expoente de Lyapunov é:

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left| \prod_{i=0}^{N-1} \frac{dF}{dx} \Big|_{x=x_i} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \ln \left| \frac{dF}{dx} \Big|_{x=x_i} \right| \quad (2.13)$$

onde $x_{k+1} = F(x_k)$ e N é a quantidade de vezes que se itera o mapa discreto. Ocorre divergência exponencial se $\lambda > 0$ ou contração se $\lambda < 0$.

Para sistemas discretos com n dimensões, os expoentes de Lyapunov são definidos por:

$$\lambda_j = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln |\Lambda_j^N|, \quad j = 1, \dots, n \quad (2.14)$$

onde $|\Lambda_j^N|$ são os módulos dos autovalores da matriz M definida por

$$M = \prod_{i=1}^N J(\mathbf{x}_i) \quad (2.15)$$

sendo $J(\mathbf{x}_i)$ a matriz jacobiana do mapa e $\prod_{i=0}^{N-1} J(\mathbf{x}_i) = J(\mathbf{x}_{N-1}) \cdots J(\mathbf{x}_0)$.

2.2.3 Dimensão de Kaplan-Yorke ou Dimensão de Lyapunov

O cálculo da dimensão de Kaplan-Yorke ou dimensão de Lyapunov utiliza os expoentes de Lyapunov (FIEDLER-FERRARA; PRADO, 1994; BROWN; BRYANT; ABARBANEL, 1991). O seu valor é usado para quantificar a dimensão de estruturas geométricas mais complexas (FIEDLER-FERRARA; PRADO, 1994) e revela o número de variáveis necessárias para descrever o comportamento assintótico do sistema (MONTEIRO, 2006). Ela é definida por:

$$D_{KY} = j + \frac{\sum_{i=1}^j \lambda_i}{|\lambda_{j+1}|} \quad (2.16)$$

onde $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n$ são os expoentes de Lyapunov ordenados de forma decrescente e j é o maior inteiro tal que $\sum_{i=1}^j \lambda_i > 0$.

A dimensão de atratores de processos não-caóticos, em sistemas de tempo contínuo, é inteira (MONTEIRO, 2006, p.439). Para processos caóticos, os atratores possuem dimensão fracionária.

Brown, Bryant e Abarbanel (1991) fazem análises interessantes sobre o cálculo da dimensão de Lyapunov a partir de dados amostrados reais, bem como a partir da reconstrução do espaço de fases a partir de um conjunto de variáveis. A precisão dos dados

amostrados é fundamental para o cálculo correto dos expoentes de Lyapunov e da dimensão de Lyapunov.

2.3 Implementações

Esta seção mostra aspectos práticos de alguns conceitos apresentados nas seções anteriores. Inicialmente, a seção 2.3.1 mostra uma abordagem para a integração numérica de sistemas conservativos. Em seguida, algumas considerações são feitas sobre algoritmos usados para calcular expoentes de Lyapunov de sistemas contínuos e discretos nas seções 2.3.2 e 2.3.3, respectivamente.

Algoritmos de integração numérica, além de fornecerem uma solução para as equações diferenciais, são usados também para calcular os expoentes de Lyapunov para sistemas dinâmicos contínuos. Libert, Hubaux e Carletti (2010) observam que se deve sempre utilizar um método de integração simplético. Caso contrário, pode-se gerar falsos indicadores do comportamento do sistema. Por exemplo, os expoentes de Lyapunov podem indicar comportamento caótico, mas, se a simulação for feita com um método de integração não-simplético, podem erroneamente indicar comportamento regular. Portanto, é de importância fundamental escolher os algoritmos adequados.

2.3.1 Integração numérica

Existem diversos métodos de integração numérica. A integração numérica de sistemas conservativos contínuos deve ser feita por meio de integradores simpléticos. Tais integradores conservam o volume no espaço de fases e, conseqüentemente, conseguem conservar a energia (CHANNEL; SCOVEL, 1990; HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006; MCHLACHLAN, 2007; MIKKOLA; PALMER, 2000; LIBERT; HUBAUX; CARLETTI, 2010).

Esta seção apresentará brevemente o critério de simplecticidade no contexto de sistemas dinâmicos e mostrará o integrador Runge-Kutta simplético, o qual foi usado para fazer a integração numérica dos sistemas contínuos (capítulo 4 - Resultados).

Alguns algoritmos podem ser obtidos em (HAIRER; HAIRER, 2002), cujas implementações podem ser diretamente baixados do sítio do autor do artigo em:

<http://www.unige.ch/~hairer/>

Critério de Simpleticidade

Uma propriedade importante de um sistema Hamiltoniano $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ é a simpleticidade do fluxo. Supondo φ_t é o fluxo do sistema Hamiltoniano, dado pela eq. (2.3), a simpleticidade é dada por:

$$\left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{x}_0}\right)^T W \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{x}_0}\right) = W, \quad W = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

onde $\varphi_t(p_0, q_0) = (p(t, p_0, q_0), q(t, p_0, q_0))$, e $p(t, p_0, q_0)$, $q(t, p_0, q_0)$ compõem a solução do sistema com condição inicial $p(0) = p_0$, $q(0) = q_0$ (HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006). O fluxo $\varphi_t : U \mapsto \mathbb{R}^{2d}$ é o mapeamento que avança a solução no tempo t e tem a propriedade de preservar o volume $\forall t$.

Um método de integração, que faz o mapeamento

$$\begin{pmatrix} \mathbf{p}_{k+1} \\ \mathbf{q}_{k+1} \end{pmatrix} = \Phi_h(\mathbf{p}_k, \mathbf{q}_k, h) \quad (2.18)$$

será simplético se

$$\left(\frac{\partial(\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{q}_{k+1})}{\partial(\mathbf{p}_k, \mathbf{q}_k)}\right)^T W \left(\frac{\partial(\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{q}_{k+1})}{\partial(\mathbf{p}_k, \mathbf{q}_k)}\right) = W \quad (2.19)$$

Runge-Kutta simplético

Considere o seguinte sistema não-autônomo:

$$\dot{y} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0 \quad (2.20)$$

A integração numérica corresponde a encontrar o valor para y do próximo instante t_1 tal que $y(t_1) = y_0 + \int_{t_0}^{t_1} f(t, y(t)) dt$.

O método Runge-Kutta (RK) de s estágios é dado por (HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006):

$$\begin{aligned} k_i &= f\left(t_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j\right), \quad i = 1, \dots, s \\ y_1 &= y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde h é o passo de integração, a_{ij} e b_i ($i, j = 1, \dots, s$) são números reais, e $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$.

Butcher (1963, 1964) inicia trabalhos importantes para a determinação dos coeficientes a_{ij} , b_i e c_i . Hairer, Lubich e Wanner (2006) afirmam que, após os trabalhos propostos por

Butcher, a literatura passa a utilizar a seguinte notação para mostrar tais coeficientes:

$$\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_s \end{array} \quad (2.22)$$

Caso os elementos a_{ij} sejam não-nulos, o método é chamado de implícito, pois as inclinações k_i não podem mais ser calculadas de forma explícita. Neste caso, faz-se necessária a resolução de um sistema de equações não-lineares. Algumas alternativas para tal problema são discutidas em (BUTCHER, 1964; HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006; MCHLACHLAN, 2007).

O método é simplético se os coeficientes satisfazem a seguinte condição:

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} = b_i b_j, \quad \forall i, j = 1, \dots, s \quad (2.23)$$

Diversos autores propõem métodos para se determinar os valores dos coeficientes a_{ij} , b_i e c_i . Hairer, Lubich e Wanner (2006) apresentam alguns destes métodos, abrangendo a determinação dos coeficientes tanto para métodos explícitos, quanto implícitos, em cuja categoria os métodos Runge-Kutta simpléticos estão inseridos. O método de Gauss propõe atribuir os valores das raízes do polinômio de Legendre deslocado

$$\frac{d^s}{dx^s} (x^s (x-1)^s) \quad (2.24)$$

aos valores c_1, \dots, c_s . Os coeficientes a_{ij} , b_i e c_i propostos por este método satisfazem a condição dada pela eq. (2.23) e, portanto, tornam o método Runge-Kutta simplético. Para o caso em que $s = 2$ (ordem 4) e que $s = 3$ (ordem 6), tais coeficientes são, respectivamente:

$$\begin{array}{c|cc} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \quad (2.25)$$

$$\begin{array}{c|ccc} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} & \frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30} \\ \frac{1}{2} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24} & \frac{2}{9} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24} \\ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30} & \frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} \\ \hline & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18} \end{array} \quad (2.26)$$

2.3.2 Expoentes de Lyapunov para sistemas dinâmicos contínuos

Um algoritmo bastante comum na literatura para calcular expoentes de Lyapunov é o mostrado em (FIEDLER-FERRARA; PRADO, 1994), derivado inicialmente a partir de (WOLF; SWIFT; SWINNEY; VASTANO, 1985; TOBOCHNIK; GOULD, 1989). Basicamente, as equações não-lineares e vetores ortonormais são integrados em um pequeno intervalo e, ao final de cada intervalo de integração, os vetores são reortonormalizados e os expoentes de Lyapunov são calculados a partir destes novos vetores. Calcula-se o primeiro expoente de Lyapunov a partir do primeiro vetor, e todos os outros vetores (e expoentes de Lyapunov) são derivados a partir deste vetor. Isto pode gerar alguns problemas, pois o algoritmo faz com que o primeiro vetor aponte para a direção instável que gera flutuações imprevisíveis, além da dificuldade de alinhamento do vetor associado aos expoentes iguais a zero (GROND; DIEBNER, 2005).

Um outro tipo de alternativa para o cálculo dos expoentes de Lyapunov para sistemas contínuos baseia-se na decomposição QR da matriz jacobiana como os métodos propostos por (DIECI; VLECK, 1995; DIECI; RUSSELL; VLECK, 1997; UDWADIA; BREMEN; PROSKUROWSKI, 1997; UDWADIA; BREMEN, 2001a, 2001b). Um problema frequente nestas abordagens é a perda de ortogonalidade da matriz Q , que pode ser contornado por meio de algumas estratégias, como o método de Cayley com a reortogonalização frequente da matriz Q (UDWADIA; BREMEN, 2001a). Uma outra abordagem, adotada neste trabalho, é por meio da substituição $Q = e^S$, pois, dessa forma, é garantida a ortogonalidade da matriz Q por construção (UDWADIA; BREMEN, 2001b).

Udwadia e Bremen (2001b) explicam o método e^S e apresentam um passo a passo para sistemas de até 3 dimensões. Uma metodologia para aplicar o método para sistemas de dimensões superiores pode ser obtida em (BREMEN, 2010a, 2010b).

O método e^S consiste na resolução das seguintes $\frac{n(n+3)}{2}$ equações diferenciais:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = f(\mathbf{x}(t)), \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \quad (2.27)$$

$$\dot{\mathbf{a}}(t) = \begin{bmatrix} \dot{a}_1(t) \\ \dot{a}_2(t) \\ \vdots \\ \dot{a}_m(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1^T H_2 \\ q_1^T H_3 \\ q_2^T H_3 \\ \vdots \\ q_i^T H_j \\ \vdots \\ q_{n-1}^T H_n \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} q_1^T J q_2 \\ q_1^T J q_3 \\ q_2^T J q_3 \\ \vdots \\ q_i^T J q_j \\ \vdots \\ q_{n-1}^T J q_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a}(0) = [\mathbf{0}]_{m \times 1}, 1 \leq i < j \leq n \quad (2.28)$$

$$\dot{\rho}_i(t) = \left(e^{-S} J e^S \right)_{(i,i)} = q_i^T J q_i, \quad \rho_i(0) = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.29)$$

onde J é a matriz jacobiana, q_k é a k -ésima coluna de e^S , $m = \frac{n(n-1)}{2}$ e S e H são dados por:

$$S = \begin{bmatrix} 0 & a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-1} \\ -a_1 & 0 & a_n & \cdots & a_{2n-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ -a_{n-2} & -a_{2n-4} & -a_{3n-5} & \cdots & a_{\frac{n(n-1)}{2}} \\ -a_{n-1} & -a_{2n-3} & -a_{3n-6} & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

$$H_k = \begin{bmatrix} \frac{\partial q_{1k}}{\partial a_1} & \frac{\partial q_{1k}}{\partial a_2} & \cdots & \frac{\partial q_{1k}}{\partial a_m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial q_{nk}}{\partial a_1} & \frac{\partial q_{nk}}{\partial a_2} & \cdots & \frac{\partial q_{nk}}{\partial a_m} \end{bmatrix} \quad (2.31)$$

Existem diversos métodos que permitem calcular e^S , tais como o método de Putzer (PUTZER, 1966) ou por meio do cálculo resíduos a partir do polinômio característico da matriz (LIMA, 2004).

Então, os expoentes de Lyapunov para o sistema contínuo serão dados por:

$$\lambda_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\rho_i(t)}{t} \quad (2.32)$$

2.3.3 Expoentes de Lyapunov para sistemas dinâmicos discretos

Os expoentes de Lyapunov para sistemas dinâmicos discretos são dados diretamente pela eq. (2.14). Porém, o cálculo da matriz M apresenta problemas numéricos quando $N \rightarrow \infty$ (FIEDLER-FERRARA; PRADO, 1994). A matriz M pode ser decomposta por uma matriz ortonormal O e outra triangular T . Nesta situação, quando $N \rightarrow \infty$, os autovalores de $\prod_{i=1}^N T(\mathbf{x}_i)$ tendem para os autovalores de $\prod_{i=1}^N J(\mathbf{x}_i)$, sendo os autovalores da matriz

diagonal T iguais aos valores dos elementos de sua diagonal. Dessa forma, os expoentes de Lyapunov são dados por:

$$\lambda_j = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln |\Lambda_j^N| = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \ln |T_{jj}^i|, \quad j = 1, \dots, n \quad (2.33)$$

onde T_{jj}^i é o elemento diagonal jj da matriz triangular T_i .

Os diversos métodos para se calcular os expoentes de Lyapunov discretos diferem-se no cálculo para fazer a ortogonalização da matriz M . Os métodos mais comuns de ortogonalização são o de Gram-Schmidt (GS) - e suas variantes, como o Gram-Schmidt modificado (MGS) e o Gram-Schmidt reortogonalizado (RGS) - e os baseados na fatoração QR - e suas variantes, como o que utiliza a transformação de *Householder* (HQR) (UDWADIA; BREMEN; PROSKUROWSKI, 1997). O método GS é numericamente instável, pois o acúmulo de erros de arredondamento levam à perda de ortogonalização dos vetores. Todos os outros métodos, de alguma forma, tentam contornar tal problema mantendo os vetores ortogonais durante todo o cálculo dos expoentes.

Um algoritmo bastante estável e eficiente para calcular os expoentes de Lyapunov discretos é o método HQR. A fatoração QR que utiliza a transformação de *Householder* produz poucos erros de arredondamento. Tanto a descrição desse método, quanto o fornecimento de um pseudo-código, são fornecidos em (UDWADIA; BREMEN; PROSKUROWSKI, 1997).

2.4 Exemplos de Sistemas Conservativos

Nesta seção são apresentados os sistemas conservativos, com suas devidas particularidades, que serão utilizados na geração e validação dos resultados.

2.4.1 Hénon-Heiles

O modelo Hénon-Heiles foi inicialmente criado para descrever o movimento estelar, durante grandes intervalos de tempo, dentro de um potencial gravitacional U_0 , de uma galáxia com simetria cilíndrica (HÉNON; HEILES, 1964). Descreve também o movimento de moléculas acopladas de forma não-linear (BARROW; LEVIN, 2003). Atualmente, este sistema conservativo é objeto de muito estudo na área de análise de sistemas não-lineares (LETELLIER; AGUIRRE; MAQUET, 2005; HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006; LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007; AGUIRRE; LETELLIER; MAQUET,

2008).

Após uma redução de ordem, (HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006; LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007) mostram que a função Hamiltoniana, com dois graus de liberdade para o sistema em questão, é:

$$H(x, y, u, v) = \frac{1}{2} (u^2 + v^2) + U(x, y) \quad (2.34)$$

onde $U(x, y)$, a função potencial, é dada por:

$$U(x, y) = \frac{1}{2} \left(x^2 + y^2 - \frac{2}{3} y^3 \right) + x^2 y \quad (2.35)$$

E, após a derivação das equações de movimento, pode-se descrever o sistema Hénon-Heiles por meio do seguinte conjunto de quatro equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial u} = u \\ \dot{y} = \frac{\partial H}{\partial v} = v \\ \dot{u} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -x - 2xy \\ \dot{v} = -\frac{\partial H}{\partial y} = -x^2 + y^2 - y \end{cases} \quad (2.36)$$

Uma forma bastante comum de se caracterizar o retrato de fase do sistema é por meio da seção de Poincaré:

$$P \equiv \{(y, u, v) \in \mathbb{R}^3 \mid x = 0, \dot{x} > 0\} \quad (2.37)$$

A condição inicial define a energia, que, por conseguinte, define a dinâmica. Ao escolher $H(x, y, u, v) < \frac{1}{6}$ e $U(x, y) \leq \frac{1}{6}$, a solução fica confinada dentro de um triângulo na superfície formada pelo plano xy (Figura 2). Barrow e Levin (2003) analisam os expoentes de Lyapunov, junto com o teste binário proposto por Gottwald e Melbourne (2003), para a detecção de caos, e concluem que o caos é presente no sistema hamiltoniano de Hénon-Heiles para valores de energia a partir de $H \approx 0,108$.

Os expoentes de Lyapunov do sistema conservativo de Hénon-Heiles dependem da condição inicial (BARROW; LEVIN, 2003) e são iguais a $\lambda_i = -\lambda_{5-i}$ para $(i = 1, \dots, 4)$ (VALLEJO; AGUIRRE; SANJUÁN, 2003).

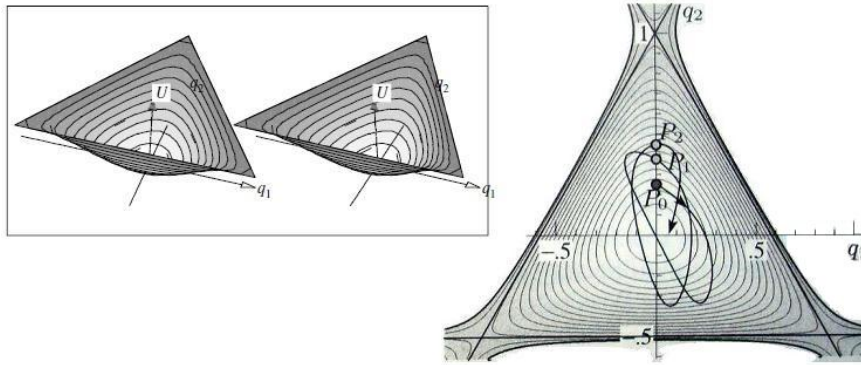


Figura 2: Potencial do sistema Hénon-Heiles e uma solução, onde $(q_1, q_2) = (x, y)$. (HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006, p. 15)

2.4.2 Sprott-Nosé-Hoover

Sistema proposto por Sprott

Equações simples podem gerar soluções caóticas (SPROTT, 1994, 2010). Um sistema deste tipo, gerado numericamente por força bruta (SPROTT, 1994; HOOVER, 1995; SPROTT; LINZ, 2000), é mostrado no sistema de equações abaixo.

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -x + yz \\ \dot{z} = 1 - y^2 \end{cases} \quad (2.38)$$

Dado que

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{f} &= \frac{\partial \dot{x}}{\partial x} + \frac{\partial \dot{y}}{\partial y} + \frac{\partial \dot{z}}{\partial z} \\ &= \frac{\partial (y)}{\partial x} + \frac{\partial (-x + yz)}{\partial y} + \frac{\partial (1 - y^2)}{\partial z} \\ &= z \end{aligned} \quad (2.39)$$

o sistema em questão não é analiticamente conservativo. Porém, simulações mostram que $\bar{z} \approx 0$ para $t \rightarrow \infty$, mantendo o divergente aproximadamente igual a zero ao longo do tempo. Conseqüentemente, tem-se um sistema que é numericamente conservativo (SPROTT, 2010).

Sistema termostático Nosé-Hoover (NH)

A eq. (2.38) é um caso especial do sistema dinâmico termostático Nosé-Hoover (NH), que exibe caos Hamiltoniano reversível no tempo (POSCH; HOOVER; VESELY, 1986; HOOVER, 1995; SPROTT, 1997). Ela foi derivada a partir de um sistema completo, in-

roduzido em (DETTMANN; MORRISS, 1997; HOOVER, 2006). A função Hamiltoniana que deu origem a tal sistema, como mostrado em (HOOVER, 2006), é dada por:

$$H_{NH} = \frac{p^2}{2s} + s \frac{q^2}{2} + s \frac{p_s^2}{2} + s \ln(s) \equiv 0 \quad (2.40)$$

cujas equações de movimento são:

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{s} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -sq \\ \dot{p}_s = -\frac{\partial H}{\partial s} = \frac{p^2}{s^2} - 1 - \frac{1}{s} \left(\frac{p^2}{2s} + s \frac{q^2}{2} + s \frac{p_s^2}{2} + s \ln(s) \right) = \frac{p^2}{s^2} - 1 \\ \dot{s} = \frac{\partial H}{\partial p_s} = s p_s \end{cases} \quad (2.41)$$

Este sistema dinâmico está relacionado com o controle de temperatura. O valor instantâneo da temperatura está relacionado com a energia cinética por meio do momento p das partículas (RÜHLE, 2007). A partir da dinâmica microscópica é possível inferir sobre a dinâmica termodinâmica e hidrodinâmica macroscópica (HOOVER, 1991), e a temperatura macroscópica (RÜHLE, 2007). p_s e s são variáveis de controle, sendo que s pode ser interpretada como uma variável sem dimensão que fornece uma nova escala no tempo e p_s é o momento conjugado. Maiores detalhes sobre tal sistema podem ser obtidos em (HOOVER, 1991, p.31-34;83-85) e (HOOVER, 2006; RÜHLE, 2007).

Sistema Sprott-Nosé-Hoover (SNH)

Aplicando-se a transformação dada pela eq. (2.42) em (2.40), chega-se à função hamiltoniana dada pela eq. (2.43).

$$\begin{cases} x = q & \Rightarrow \dot{x} = \dot{q} \\ y = \frac{p}{s} & \Rightarrow \dot{y} = \frac{\dot{p}}{s} - \frac{p}{s^2} \dot{s} \\ z = -p_s & \Rightarrow \dot{z} = -\dot{p}_s \end{cases} \quad (2.42)$$

$$H_{SNH} = s \left(\frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} + \frac{z^2}{2} + \ln(s) \right) \equiv 0 \quad (2.43)$$

O novo conjunto de equações gerado a partir desta transformação sobre sistema com-

pleto, eq. (2.41), é dado por:

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -x + yz \\ \dot{z} = 1 - y^2 \\ \dot{s} = -sz \end{cases} \quad (2.44)$$

O sistema dado pela eq. (2.44), doravante denominado sistema Sprott-Nosé-Hoover(SNH), é analiticamente conservativo. E, para manter-se conservativo, deve ter a seguinte condição inicial:

$$(x, y, z, s) = \left(x_0, y_0, z_0, e^{-\frac{1}{2}(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2)} \right) \quad (2.45)$$

O retrato de fase do sistema (2.44) pode ser caracterizado pela seguinte seção de Poincaré:

$$P \equiv \{(x, y, s) \in \mathbb{R}^3 \mid z = 0, \dot{z} > 0\} \quad (2.46)$$

2.5 Métodos de discretização

As metodologias de discretização, que serão aplicadas sobre os sistemas da seção 2.4 anterior, são detalhadas a seguir.

2.5.1 Definição geral do modelo discreto

Um modelo discretizado, independentemente de qual foi o método de discretização utilizado, é dado por:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{g}(\mathbf{x}_k, h) \quad (2.47)$$

onde $\mathbf{x}_k = (x_1^k, \dots, x_n^k) \in \mathbb{R}^n$ são as variáveis dinâmicas no tempo $t = t_0 + kh$, e h é o passo da discretização no tempo para o modelo. Dado que modelos discretizados a partir de um conjunto de equações diferenciais possuem um parâmetro a mais, o passo h , seu espaço de parâmetros é maior. O modelo discretizado acima é o resultado da aplicação de um método de discretização sobre o sistema dinâmico contínuo, eq. (2.1), e será referenciado nas seções seguintes.

Existem diversos métodos de discretização (SVORONOS; PAPAGEORGIOU; TSILIGIANNIS, 1994; ZHANG et al., 2009; MICKENS, 2002; MENDES; BILLINGS, 2002). Os explorados no presente trabalho serão o proposto por Ronald Mickens (MICKENS, 2002, 2005, a, b), seção 2.5.2, e o proposto por Monaco e Normand-Cyrot (MONACO;

NORMAND-CYROT, 1990; MENDES; BILLINGS, 2002; LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007), seção 2.5.3.

2.5.2 Método de discretização proposto por Mickens

O método de discretização proposto por Mickens consiste na aplicação de um conjunto de regras para criar modelos discretizados a partir da equação diferencial (MICKENS, 2002).

Para cada variável x_i^k do sistema da eq. (2.47), inicialmente faz-se as transformações das derivadas:

$$\dot{x}_i \mapsto \frac{x_{k+1}^i - \psi_i x_k^i}{\phi} \quad (2.48)$$

onde ψ_i e ϕ_i dependem do passo da discretização h e outros parâmetros da equação diferencial, sendo:

$$\psi_i = 1 + \mathcal{O}(h) \quad (2.49)$$

$$\phi_i = 1 + \mathcal{O}(h^2) \quad (2.50)$$

Normalmente, considera-se $\psi_i = 1$. O cálculo exato deste parâmetro é mostrado por meio de exemplos em (MICKENS, 2002).

Para equações não-lineares, (MICKENS, 2002; LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007) mostram que uma boa tentativa para ϕ_i é:

$$\phi_i(h, R_i^*) = \frac{1 - e^{-R_i^* h}}{R_i^*} \quad (2.51)$$

onde R_i^* é dado por:

$$R_i^* = \max \{ |R_p| ; p = 1, 2, \dots, P \} \quad (2.52)$$

e R_p por:

$$R_p \equiv (J|_{x=\bar{x}^{(p)}})_{ii} = \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{x=\bar{x}^{(p)}} \right)_{ii} \quad (2.53)$$

sendo J a matriz jacobiana, $\bar{x}^{(p)}$ um ponto-fixo do sistema representado pela equação (2.1), e P o total de pontos-fixos. R_i^* corresponde ao maior valor em módulo do elemento ii da diagonal da matriz jacobiana avaliado em todos os pontos-fixos.

ϕ_i dado pela eq. (2.51) serve para renormalizar a escala de tempo, garantindo que o passo de discretização nunca seja maior que a menor escala de tempo. Desde que se

atenda $0 < \phi < \frac{1}{R_i^*}$, consegue-se atender à menor escala de tempo e, portanto, gerar-se-á soluções válidas para o modelo. Por simplicidade, e desde que se atente aos limites máximos permitidos para ϕ , é comum usar a seguinte expressão para esta variável:

$$\phi = h \quad (2.54)$$

O próximo passo é realizar o mapeamento das variáveis contínuas para as discretas. Isto é feito por meio de substituições da variável contínua para sua representação discreta em cada equação. Utiliza-se preferencialmente representações discretas não-locais para os termos não-lineares, de forma a reduzir instabilidades numéricas. Diversos exemplos são mostrados em (MICKENS, 2002, 2005, a, b) para termos lineares, quadráticos e cúbicos. A seguir, serão apresentados alguns deles. Possíveis trocas da variável u contínua para a sua representação discreta são:

$$u \rightarrow u_k \quad (2.55)$$

$$u \rightarrow u_{k+1} \quad (2.56)$$

E para um termo quadrático, possíveis trocas são:

$$u^2 \rightarrow u_{k+1} u_k \quad (2.57)$$

$$u^2 \rightarrow 2(u_k)^2 - u_{k+1} u_k \quad (2.58)$$

$$u^2 \rightarrow \frac{a u_{k+1}^2 + b u_{k+1} u_k + a u_k^2}{2a + b} \quad (2.59)$$

e, da mesma forma, para termos cúbicos, pode-se ter:

$$u^3 \rightarrow u_k^2 u_{k+1} \quad (2.60)$$

$$u^3 \rightarrow u_k u_{k+1}^2 \quad (2.61)$$

A escolha de qual representação discreta utilizar está diretamente relacionada ao modelo discreto.

O último item a ser observado diz respeito a ordem em que será feito o mapeamento da variável contínua para a discreta. Isto também influencia diretamente o modelo discreto a ser obtido. Somente se pode fazer uma substituição de uma variável no instante $k+1$ se esta já tiver tido a sua respectiva equação de diferenças definida ou então se esta estiver na equação de diferenças em que se está ocorrendo tal definição. Por exemplo, considere

a seguinte equação diferencial:

$$\begin{cases} \dot{x} = xy \\ \dot{y} = x^2 + y^2 \end{cases} \quad (2.62)$$

Inicialmente, pode-se optar por começar as substituições pela primeira ou pela segunda equação. Supondo que se inicie pela primeira equação, a utilização do termo x_{k+1} poderá ser feita tanto na primeira, quanto na segunda equação. Porém, y_{k+1} somente poderá ser usado na segunda equação. Alguns possíveis modelos são:

$$\begin{cases} \frac{x_{k+1} - \psi x_k}{\phi} = x_{k+1} y_k \\ \frac{y_{k+1} - \psi y_k}{\phi} = x_k x_{k+1} + y_k^2 \end{cases} \quad (2.63)$$

$$\begin{cases} \frac{x_{k+1} - \psi x_k}{\phi} = x_k y_k \\ \frac{y_{k+1} - \psi y_k}{\phi} = x_k x_{k+1} + y_k y_{k+1} \end{cases} \quad (2.64)$$

Porém, se a substituição tivesse sido iniciada pela segunda equação, modelos completamente diferentes poderiam ter sido obtidos, pois a segunda equação aceitaria termos y_{k+1} , e a primeira equação aceitaria termos tanto y_{k+1} quanto x_{k+1} . Nesta situação, outros exemplos de modelos possíveis são:

$$\begin{cases} \frac{y_{k+1} - \psi y_k}{\phi} = x_k^2 + y_k y_{k+1} \\ \frac{x_{k+1} - \psi x_k}{\phi} = x_{k+1} y_{k+1} \end{cases} \quad (2.65)$$

$$\begin{cases} \frac{y_{k+1} - \psi y_k}{\phi} = x_k^2 + y_{k+1}^2 \\ \frac{x_{k+1} - \psi x_k}{\phi} = x_k y_{k+1} \end{cases} \quad (2.66)$$

Portanto, existem diversas possibilidades de modelos usando a abordagem proposta por Mickens. O critério de escolha de que modelo utilizar cabe ao interessado mediante simulações e análises em cada problema em questão.

2.5.3 Proposto por Monaco e Normand-Cyrot

Descrição do método

Mendes e Billings (2002) e Letellier, Mendes e Mickens (2007) mostram que a discretização, originalmente proposta por Monaco e Normand-Cyrot (1990), pode ser obtida em termos da expansão da exponencial de Lie da eq. (2.1), conforme equação abaixo:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \sum_{n=1}^{\eta} \frac{h^n}{n!} L_f^n(\mathbf{x}_k) \quad (2.67)$$

onde η é a ordem da expansão. A derivada de Lie é dada por:

$$L_f(\mathbf{x}_k) = \sum_{j=1}^m f_j \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x_j} \quad (2.68)$$

onde f_j representa a j -ésima componente do campo vetorial. As ordens mais elevadas da derivada são dadas, recursivamente, por:

$$L_f^n(\mathbf{x}_k) = L_f \left(L_f^{n-1}(\mathbf{x}_k) \right) \quad (2.69)$$

A ordem da expansão (2.67) pode ser truncada para evitar um número excessivo de termos, que tornariam a simulação com termos de ordem muito elevada computacionalmente inviável. Além do mais, quando $\eta \rightarrow \infty$, os termos tendem para zero até o ponto em que não é mais possível acrescentar nenhuma nova informação ao modelo devido à falta de precisão computacional.

Quando $\eta = 1$, tem-se a discretização dada pelo método explícito de Euler, cujo modelo preserva a quantidade e a localização dos pontos-fixos das equações diferenciais originais (MENDES; BILLINGS, 2002). Para $\eta \geq 2$, mantém-se a mesma localização dos pontos-fixos do sistema original, porém, com a adição de novos pontos-fixos, espúrios, cujas quantidades e localizações dependem da ordem η e do passo temporal da discretização h , respectivamente.

Descrição da matriz jacobiana do modelo discretizado

Para o sistema discreto da eq. (2.47), a matriz jacobiana é dada por:

$$J_k^\eta(\mathbf{x}_k, h) = \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}_k} = \frac{\partial (x_1^{k+1}, \dots, x_n^{k+1})}{\partial (x_1^k, \dots, x_n^k)} \quad (2.70)$$

onde, para cada elemento (i, j) , tem-se:

$$\begin{aligned} (J_k^\eta)_{ij} &= \frac{\partial x_i^{k+1}}{\partial x_j^k} = \mathcal{O}(h^\eta) & i \neq j \\ (J_k^\eta)_{ii} &= \frac{\partial x_i^{k+1}}{\partial x_i^k} = 1 + \mathcal{O}(h^\eta) & i = j \end{aligned} \quad (2.71)$$

e $\mathcal{O}(h^\eta)$ é um polinômio de h de ordem η , sem o termo constante. Portanto, quando $h \rightarrow 0$, J_k^η tende à matriz identidade e $\mathbf{x}_{k+1} \rightarrow \mathbf{x}_k$.

2.6 Próximos passos

O próximo capítulo, capítulo 3 - Metodologia, definirá a estratégia que foi utilizada para se conseguir atingir os objetivos propostos no capítulo 1 anterior. Ele utiliza os conceitos apresentados neste capítulo 2 - Referencial Teórico - para explorar tantos os aspectos táticos da metodologia, quanto as questões relativas à implementação. Os resultados da aplicação desta metodologia serão apresentados no capítulo 4 - Resultados.

3 *Metodologia*

3.1 Apresentação da metodologia

O intuito do presente trabalho é encontrar e analisar modelos discretizados dinamicamente válidos obtidos a partir de um método de discretização. Para tanto, será guiado pelos seguintes passos:

1. Escolher um sistema conservativo, entre aqueles apresentados na seção 2.1;
2. Definir um nível de energia e derivar a condição inicial;
3. Simular as equações diferenciais do sistema contínuo escolhido (seção 3.2.1);
4. Gerar uma seção de Poincaré que seja característica do sistema (seção 3.2.2);
5. Calcular o passo máximo da discretização que satisfaça o critério de Nyquist, conforme explicado em seguida na seção 3.2.3;
6. Calcular os expoentes de Lyapunov e a dimensão de Kaplan-Yorke (seção 3.2.4);
7. Obter o conjunto de equações de diferenças a partir do resultado da aplicação de um método de discretização descrito na seção 2.5;
8. Simular as equações de diferenças do modelo discretizado para diversos valores de passo de discretização;
9. Para cada uma das simulações do passo anterior:
 - gerar uma seção de Poincaré que seja característica do sistema;
 - calcular a média e o desvio padrão da energia em estado estacionário, ou a média e o desvio padrão para um grupo de termos que compõe a equação da energia, conforme detalhamento feito na seção 3.2.5 seguinte;

- calcular a média e o desvio padrão do produto dos autovalores da matriz jacobiana, conforme explicações da seção 3.2.6;
- calcular índices que permitem mostrar a perda de energia nos modelos discretizados, conforme explicações da seção 3.2.8;
- calcular os expoentes de Lyapunov e realizar análises, conforme explicações da seção 3.2.4.

10. Gerar gráficos dos itens do passo anterior em função do passo de discretização.

Alguns passos acima, necessários para a geração dos resultados, merecem comentários para tornar claro alguns aspectos de implementação ou da análise que será feita no capítulo 4 - Resultados. Tais comentários são feitos na seção 3.2 a seguir.

3.2 Considerações sobre os passos necessários para obtenção dos resultados

3.2.1 Simulação do sistema contínuo

Existem diversos fatores que influenciam o resultado da simulação de um sistema não-linear, tais como o computador utilizado na simulação, o compilador, a forma como se construiu o programa (por exemplo, se foram utilizadas variáveis ou se foram declaradas constantes diretas no código, que resultará na precisão numérica usada em memória ou nos registradores), dentre outros.

Neste trabalho, o computador utilizado foi um *Turion* de 64 bits. As simulações foram realizadas usando o Matlab x64.

O algoritmo utilizado para obter a solução foi o método de integração Runge-Kutta com coeficientes Gauss-Legendre de ordem 4. Ele é um método simplético e, portanto, conserva o volume no espaço de fases (seção 2.3.1). A sua implementação em Matlab encontra-se no anexo A. O passo de integração utilizado foi igual a $h = 0,001$, suficientemente pequeno, como será mostrado ao longo do trabalho.

3.2.2 Geração da seção de Poincaré

Uma forma de se caracterizar um sistema não-linear é por meio de uma seção de Poincaré. Ela facilita a visualização da estrutura de um atrator¹. Apesar de não existirem, a rigor, atratores para sistemas conservativos, pois eles são típicos de sistemas dissipativos, o termo será usado ao longo deste trabalho para descrever a estrutura geométrica gerada pelo fluxo do sistema dinâmico devido a sua similaridade com atratores dissipativos.

O embasamento teórico sobre a seção de Poincaré foi dada na seção 2.2.1. No caso de sistemas conservativos, a verossimilhança do modelo discretizado com o sistema contínuo se dá também por meio da manutenção da simetria da seção, típica de sistemas conservativos.

A seção de Poincaré, quando considerada apenas nos casos perpendiculares aos eixos, é definida por:

$$P \equiv \{(x_1, \dots, x_{p-1}, x_{p+1}, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^{n-1} \mid x_p = \alpha\} \quad (3.1)$$

Portanto, a seção de Poincaré corresponde ao conjunto dos pontos em que sejam verificadas as condições: $x_p = \alpha$, que fornece a interseção com o plano; e $\dot{x}_p > 0$ ou $\dot{x}_p < 0$, que fornece a direção de perfuração da seção. Neste trabalho, optou-se por utilizar a condição $\dot{x}_p > 0$. Numericamente, isto é feito da seguinte forma.

Suponha que um sistema dinâmico não-linear, dado pela eq. (2.1), seja simulado. O vetor com o resultado numérico da simulação é dado por:

$$\begin{bmatrix} x_1(t) \\ \vdots \\ x_{p-1}(t) \\ x_p(t) \\ x_{p+1}(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1(t_0) & x_1(t_1) & \cdots & x_1(t_{a-1}) & x_1(t_a) & \cdots & x_1(t_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{p-1}(t_0) & x_{p-1}(t_1) & \cdots & x_{p-1}(t_{a-1}) & x_{p-1}(t_a) & \cdots & x_{p-1}(t_N) \\ x_p(t_0) & x_p(t_1) & \cdots & x_p(t_{a-1}) & x_p(t_a) & \cdots & x_p(t_N) \\ x_{p+1}(t_0) & x_{p+1}(t_1) & \cdots & x_{p+1}(t_{a-1}) & x_{p+1}(t_a) & \cdots & x_{p+1}(t_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_n(t_0) & x_n(t_1) & \cdots & x_n(t_{a-1}) & x_n(t_a) & \cdots & x_n(t_N) \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

Em seguida, itera-se o conjunto de pontos obtidos na simulação, verificando-se, para

¹Atratores são regiões limitadas do espaço de fases de sistemas dissipativos para as quais trajetórias convergem depois de um tempo suficientemente longo (MONTEIRO, 2006, p. 420), (FIEDLER-FERRARA; PRADO, 1994, p. 85).

cada ponto, a seguinte condição:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q} &= \mathcal{Q}_1 \wedge \mathcal{Q}_2 \\
\mathcal{Q}_1 &= [(x_p(t_a) - \alpha \geq -\varepsilon) \wedge (x_p(t_{a-1}) - \alpha \leq +\varepsilon)] \vee \\
&\quad [(x_p(t_a) - \alpha \leq +\varepsilon) \wedge (x_p(t_{a-1}) - \alpha \geq -\varepsilon)] \\
\mathcal{Q}_2 &= \frac{x_p(t_a) - x_p(t_{a-1})}{h} > 0
\end{aligned} \tag{3.3}$$

onde ε é o epsilon de máquina, ou seja, o limite de erro relativo devido a arredondamentos em operações aritméticas com pontos flutuantes (PRESS et al., 2007), \wedge é o operador lógico E e \vee é o operador lógico OU. Caso a condição \mathcal{Q} da eq. (3.3) seja verdadeira, calcula-se percentualmente o quanto se está longe do plano definido por $x_p = \alpha$:

$$\lambda = \frac{\alpha - x_p(t_{a-1})}{x_p(t_a) - x_p(t_{a-1})} \tag{3.4}$$

e, em seguida, aplica-se o resultado para inferir a localização do restante dos pontos:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{p-1} \\ x_{p+1} \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}_{\text{Poincare}} = \begin{bmatrix} x_1(t_{a-1}) + \lambda (x_1(t_a) - x_1(t_{a-1})) \\ \vdots \\ x_{p-1}(t_{a-1}) + \lambda (x_{p-1}(t_a) - x_{p-1}(t_{a-1})) \\ x_{p+1}(t_{a-1}) + \lambda (x_{p+1}(t_a) - x_{p+1}(t_{a-1})) \\ \dots \\ x_n(t_{a-1}) + \lambda (x_n(t_a) - x_n(t_{a-1})) \end{bmatrix} \tag{3.5}$$

O conjunto dos pontos acima forma a seção de Poincaré. Ressalta-se que esta seção de Poincaré é uma aproximação, pois as variáveis evoluem em taxas diferentes. A aproximação linear da distância de uma variável ao plano pode não se dar na mesma proporção para outras variáveis mais rápidas ou mais lentas, criando distorções. Para reduzir estas distorções, a inferência das variáveis da seção de Poincaré pode ser feita aproximando-se a distância dos pontos à seção por meio de outras curvas, como polinômios quadráticos ou cúbicos. Neste trabalho, levando-se em consideração a taxa de variação dos sistemas e os passos de discretização utilizados, esta distorção não é significativa a ponto de ser necessário fazer outros tipos de aproximação para as outras variáveis da seção de Poincaré.

3.2.3 Passo máximo de discretização

Oppenheim e Willsky (1998) definem qual é a frequência de Nyquist, limite máximo da frequência que um sinal discreto x_k amostrado a partir de um sinal contínuo $x(t)$ pode ter para se reconstruir o sinal contínuo sem sobreposição de frequências. A frequência de Nyquist $f_{Nyquist}$ é igual a duas vezes a frequência máxima de interesse do sinal contínuo f_{sinal}^{max} .

$$f_{Nyquist} = 2 f_{sinal}^{max} \quad (3.6)$$

sendo f_{sinal}^{max} a frequência que resulte em uma amplitude $|X(j\omega)|$ suficientemente pequena, ou seja, $|X(j\omega)| \approx 0$ para $f > f_{sinal}^{max}$.

Deve-se ter a frequência de amostragem f_s maior que a frequência de Nyquist, $f_s > f_{Nyquist}$, para evitar a sobreposição de frequências.

Letellier e Mendes (2004,2005) e Letellier, Mendes e Mickens (2007) mostram que a solução obtida por meio da simulação de um modelo discretizado é equivalente à simulação do sistema contínuo original podendo diferir apenas em um deslocamento no espaço dos parâmetros, desde de que se atenda ao critério de Nyquist. Portanto, a partir da frequência de Nyquist, pode-se inferir o passo máximo da discretização para qualquer modelo discretizado. O cálculo deste passo é de suma importância, pois somente as simulações que utilizem passo de discretização abaixo deste valor é que poderão ser considerados equivalentes às do sistema contínuo:

$$f > 2 f_{sinal}^{max} \Rightarrow h < \frac{1}{2 f_{sinal}^{max}} \quad (3.7)$$

sendo $f = \frac{1}{h}$.

O cálculo do passo máximo deve considerar todas as variáveis do sistema. Deve-se analisar a frequência máxima de cada variável da simulação do sistema contínuo. A frequência máxima de todas as variáveis, f^{max} , resultará no passo máximo de discretização sugerido pelo critério de Nyquist:

$$h_{max} = \frac{1}{2 f^{max}} - \delta, \quad 0 < \delta \ll 1 \quad (3.8)$$

sendo δ arbitrariamente pequeno.

3.2.4 Expoentes de Lyapunov e dimensão de Kaplan-Yorke

Os expoentes de Lyapunov devem ser determinados para que seja possível calcular os índices:

- soma dos expoentes de Lyapunov;
- dimensão de Kaplan-Yorke.

Os expoentes de Lyapunov para os sistemas contínuos foram calculados diretamente pela resolução do conjunto de equações diferenciais, eq. (2.27)-(2.29), mostradas na seção 2.3.2. Para o sistema com 4 dimensões, S e e^S são dados por:.

$$S = \begin{bmatrix} 0 & a_1 & a_2 & a_3 \\ -a_1 & 0 & a_4 & a_5 \\ -a_2 & -a_4 & 0 & a_6 \\ -a_3 & -a_5 & -a_6 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

$$e^S = \begin{cases} Q_1 & , \text{ se } \alpha = \beta = 0 \\ Q_2 & , \text{ se } \alpha = \beta \neq 0 \\ Q_3 & , \text{ se } \beta = 0, \alpha \neq 0, \mu_1 = \mu_2 = \mu \\ Q_4 & , \text{ se } \mu_1 \neq \mu_2 \end{cases} \quad (3.10)$$

onde $\alpha = \sum_{i=1}^6 a_i^2$, $b = \det(S)$, $\beta = \sqrt{\alpha^2 - 4b}$, $\mu_1 = \sqrt{\frac{\alpha - \beta}{2}}$, $\mu_2 = \sqrt{\frac{\alpha + \beta}{2}}$ e Q_1 a Q_4 são dados por:

$$\begin{aligned} Q_1 &= I \\ Q_2 &= I + S + \frac{1 - \cos(\mu_2)}{\mu_2^2} S^2 + \frac{\mu_2 - \sin(\mu_2)}{\mu_2^3} S^3 \\ Q_3 &= \frac{1}{2} (2 \cos(\mu) + \mu \sin(\mu)) I + \frac{3 \sin(\mu) - \mu \cos(\mu)}{2\mu} S \\ &\quad + \frac{\sin(\mu)}{2\mu} S^2 + \frac{\sin(\mu) - \mu \cos(\mu)}{2\mu^3} S^3 \\ Q_4 &= \frac{\mu_2^2 \cos(\mu_1) - \mu_1^2 \cos(\mu_2)}{\mu_2^2 - \mu_1^2} I + \frac{\mu_2^3 \sin(\mu_1) - \mu_1^3 \sin(\mu_2)}{\mu_1 \mu_2 (\mu_2^2 - \mu_1^2)} S \\ &\quad + \frac{\cos(\mu_1) - \cos(\mu_2)}{\mu_2^2 - \mu_1^2} S^2 + \frac{\mu_2 \sin(\mu_1) - \mu_1 \sin(\mu_2)}{\mu_1 \mu_2 (\mu_2^2 - \mu_1^2)} S^3 \end{aligned} \quad (3.11)$$

Os expoentes de Lyapunov discretos foram calculados com base na aplicação direta da fórmula (2.33). O método HQR (seção 2.3.3) é bastante estável e eficiente para se calcular os expoentes de Lyapunov discretos. E o Matlab utiliza refletores de *Householder* na implementação da fatoração QR (UDWADIA; BREMEN; PROSKUROWSKI, 1997). Portanto, a simples implementação desta fórmula já é robusta devido ao algoritmo de fatoração QR do Matlab. No cálculo do expoente, descartou-se os 1000 valores iniciais da

simulação ($N_{transiente} = 1000$) a fim de eliminar transientes, a mesma estratégia adotada em (MONTEIRO, 2006). O seguinte algoritmo foi utilizado para o cálculo dos expoentes de Lyapunov discretos (FIEDLER-FERRARA; PRADO, 1994; UDWADIA; BREMEN; PROSKUROWSKI, 1997):

Algoritmo 1 Cálculo dos expoentes de Lyapunov para sistemas discretos.

```

 $\mathbf{x}_k \leftarrow \mathbf{x}_0$ 
SOMA  $\leftarrow [0]_{1 \times n}$ 
for  $k = 0$  to  $N$  do
  if  $k \geq N_{transiente}$  then
     $\mathbf{J}_k(\mathbf{x}_k, h) \leftarrow \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}_k}$  % Jacobiano
     $[\mathbf{O}, \mathbf{T}] = \text{QR}(\mathbf{J}_k)$  % O=Ortogonal, T=Triangular
    for  $j = 1$  to  $n$  do
       $SOMA_j = SOMA_j + \ln |T_{jj}|$ 
       $\lambda_j = SOMA_j / (k - N_{transiente} + 1)$ 
    end for
  end if
   $\mathbf{x}_k \leftarrow \mathbf{g}(\mathbf{x}_k, h)$ 
end for

```

Uma vez com os expoentes calculados, a soma dos expoentes é diretamente obtida por:

$$\mathcal{V} = \sum_{i=1}^n \lambda_i \quad (3.12)$$

Existem duas premissas para expoentes de Lyapunov de sistemas conservativos hamiltonianos (seção 2.1.3):

1. $\mathcal{V} = \sum_{i=1}^n \lambda_i = 0$
2. $\lambda_i = -\lambda_{n+1-i}$ para $(i = 1, \dots, n)$, $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_i \geq \dots \geq \lambda_n$

Para analisar a primeira premissa, basta verificar o quão distante \mathcal{V} está do zero. A segunda premissa pode ser analisada segundo:

$$\mathcal{S} = \frac{\max(|\lambda_i|, |\lambda_{n+1-i}|)}{\min(|\lambda_i|, |\lambda_{n+1-i}|)} \quad (3.13)$$

sendo que \mathcal{S} mais próximo de 1,00 significa que os expoentes são simétricos, pois isto significa que λ_i e λ_{n+1-i} são mais próximos em módulo.

Para se calcular a dimensão de Kaplan-York, basta aplicar os expoentes de Lyapunov diretamente na fórmula da eq. (2.16). Portanto, tem-se que:

$$D_{KY} = (n-1) + \frac{\sum_{i=1}^{n-1} \lambda_i}{|\lambda_n|} = n-1 + \frac{\lambda_1}{|\lambda_n|} = n-1 + \frac{\lambda_1}{|-\lambda_1|} = n \quad (3.14)$$

Assim, para sistemas conservativos hamiltonianos, deve-se ter a dimensão de Kaplan-Yorke igual a n . Esta é uma condição necessária, mas não é suficiente. Podem existir sistemas que possuem a dimensão igual a n que não são conservativos.

3.2.5 Energia em estado estacionário

A energia é dada pela função hamiltoniana. O valor da energia do modelo discretizado depende tanto da estrutura do modelo, quanto do passo de discretização h . Para verificar alterações da energia para diferentes valores do passo de discretização, pode-se utilizar a média e o desvio padrão amostrais da energia na simulação do modelo discreto, dados por:

$$\mu_H = \frac{1}{N-C+1} \times \sum_{k=C}^N H(x_k) \quad (3.15)$$

$$\sigma_H = \sqrt{\frac{1}{N-C} \times \sum_{k=C}^N (H(x_k) - \mu_H)^2} \quad (3.16)$$

onde C é o instante aproximado em que se encerra o transitório da resposta. Neste trabalho, para o cálculo da média da energia em estado estacionário, utilizou-se aproximadamente dez mil pontos em instantes após $Ch > 3000s$ para eliminar o período transitório, ou seja, $C = 3000/h$ e $N = C + 10000$. A rigor, sistemas conservativos não deveriam apresentar transitório. Mas, como a solução de tais sistemas (que se encontram em regime dinâmico caótico) é uma aproximação numérica, é prudente eliminar os valores iniciais da simulação para evitar transitórios numéricos indesejados.

Para que o modelo discretizado seja exatamente conservativo, espera-se que μ_H seja igual à energia definida no sistema contínuo, e que σ_H seja igual a 0, ou seja, a energia é constante em todos os instantes k .

Em alguns casos, a energia total de um sistema pode ser igual a zero. Por exemplo, suponha que a energia de um sistema conservativo seja apenas composta pelas energias cinética e potencial. Neste caso, a energia total do sistema é igual a $H = H_{cinetica} + H_{potencial}$. Se $H_{potencial} = -H_{cinetica}$, então a energia total do sistema será igual a zero

($H = 0$). Situação semelhante ocorre com o sistema Sprott-Nosé-Hoover, eq. (2.43), cuja energia total é igual a 0. E, neste caso, a energia do modelo discretizado igual a 0 não permite inferir se o modelo discretizado está conservando a energia ou se está se comportando como um sistema dissipativo. O somatório dos termos que compõe a energia podem continuar sendo igual a zero, mas o modelo pode estar perdendo energia por meio de algumas variáveis. Para verificar o comportamento da energia, pode-se realizar a análise da média de um grupo de termos da energia a fim que se possa detectar variações absolutas da energia e evidenciar perdas. Por exemplo, considere a seguinte função hamiltoniana:

$$H = H_1 + H_2 \equiv 0 \quad (3.17)$$

Neste caso, pode-se considerar a média e o desvio padrão amostrais de apenas um grupo de termos, como média da energia cinética, potencial, ou qualquer outra combinação de termos:

$$\mu_{H_1} = \frac{1}{N-C+1} \times \sum_{k=C}^N H_1(x_k) \quad (3.18)$$

$$\sigma_{H_1} = \sqrt{\frac{1}{N-C} \times \sum_{k=C}^N (H_1(x_k) - \mu_{H_1})^2} \quad (3.19)$$

3.2.6 Produto dos autovalores da matriz jacobiana

O valor médio e o desvio padrão do produto dos autovalores da matriz jacobiana também é uma outra medida de interesse no contexto da conservação da energia. São eles:

$$\mu_{\mathcal{L}} = \frac{1}{N+1} \times \sum_{k=C}^{N-C+1} \mathcal{L}(\mathbf{x}_k) \quad (3.20)$$

$$\sigma_{\mathcal{L}} = \sqrt{\frac{1}{N-C} \times \sum_{k=C}^N (\mathcal{L}(\mathbf{x}_k) - \mu_{\mathcal{L}})^2} \quad (3.21)$$

Como mostrado pela eq. (2.8) da seção 2.1.3 (p. 24), deve-se ter $\mu_{\mathcal{L}} = 1,0$ para o modelo discretizado ser conservativo. Deseja-se também que $\sigma_{\mathcal{L}} = 0,0$ para que $\mathcal{L}(\mathbf{x}_k) = 1,0 \forall k$.

3.2.7 Traço da matriz jacobiana

O traço da matriz jacobiana também pode ser um indicador da conservação de energia, como visto na eq. (2.9) da seção 2.1.3. Desde que h seja pequeno, o traço deve ser constante e igual à dimensão do sistema para que ocorra a conservação da energia. Este fato foi usado em trabalhos anteriores (LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007; BASTOS; MENDES, 2010b) e será usado em análises posteriores no capítulo 4 - Resultados.

Com relação ao método de discretização proposto por Monaco e Normand-Cyrot, uma outra quantidade de interesse é o incremento do traço à medida em que a ordem do modelo discretizado é aumentada (BASTOS; MENDES, 2010b):

$$\Delta tr\{J_k^\eta\} = tr\{J_k^\eta\} - tr\{J_k^{\eta-1}\} \quad (3.22)$$

O incremento no traço fornece qual é a variação do traço resultante da adição de um termo na ordem da discretização do método proposto por Monaco e Normand-Cyrot. Portanto, como será visto posteriormente, serão estudados incrementos que resultem em um traço mais próximo possível da dimensão do sistema com o intuito de conservar a energia.

3.2.8 Índices de conservação da energia

Considere a simulação de um dado modelo discreto nos instantes $k = (0, 1, \dots, N)$. Para se ter a energia conservada, deve-se ter a condição dada pela eq. (2.6) da seção 2.1.3 ao longo da simulação. Assim, uma forma de se analisar a conservação da energia é:

$$\mathcal{H}_1 = \frac{1}{Nh} \times \sum_{k=0}^{N-1} (H(x_{k+1}) - H(x_k)) = \frac{1}{Nh} \times (H(x_N) - H(x_0)) \rightarrow 0 \quad (3.23)$$

e também:

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{Nh} \times \sum_{k=0}^{N-1} |H(x_{k+1}) - H(x_k)| \rightarrow 0 \quad (3.24)$$

onde \mathcal{H}_1 é a média da variação total da energia e \mathcal{H}_2 é a média da variação absoluta da energia, ambos normalizados por um período de simulação (1s).

Os índices de conservação de energia \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 podem ser usados para realizar uma análise comparativa entre modelos, pois leva em consideração variações de energia ao longo de um mesmo período. O índice \mathcal{H}_1 fornece uma medida de uma variação da energia levando-se em consideração um nível de energia inicial e final. O índice \mathcal{H}_2 fornece

uma medida de uma variação absoluta da energia. Assim, eles são complementares. Por exemplo, se \mathcal{H}_1 é muito pequeno, mas \mathcal{H}_2 não, significa que a energia se conserva ao longo do tempo, mas apenas na média, pois ocorre uma variação não desprezível em termos absolutos ao longo de um passo. Para que a energia se conserve durante toda a simulação, \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 devem ser o menor possível.

3.2.9 Gráficos em função do passo de discretização

Diversos gráficos podem ser obtidos em função do passo de discretização h . Uma maneira interessante para se investigar a robustez da discretização é obtida por meio da análise da mudança da seção de Poincaré característica do sistema à medida que o passo da discretização aumenta. Supondo que uma seção de Poincaré característica do sistema fosse bidimensional, a adição do passo h resultaria em um gráfico tridimensional. Devido à dificuldade da representação e análise do gráfico $3D$, escolheu-se por fazer cortes na seção de Poincaré para que se tenha um gráfico $2D$. Supondo que a seção de Poincaré seja formada pelas variáveis (x_i, x_j) , um corte válido seria $x_i = 0$ em que fosse possível exibir a simetria do sistema conservativo, ou então em que fosse possível exibir alguma informação importante sobre alterações no atrator. Em termos numéricos, o corte é formado pelos pontos da seção de Poincaré em que x_i está dentro do intervalo $[-\delta, \delta]$, onde δ é um valor pequeno arbitrado para cada caso. Em (LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007), utiliza-se δ aproximadamente igual a 2% do valor máximo de x_i , abordagem que será utilizada também neste trabalho, ou seja, $\delta = 0,02 \times \max(|x_i|)$. Tais cortes em função de h podem ser um bom indicador de robustez e funcionar como um diagrama de bifurcação.

Outros gráficos que servirão como base para as análises são os formados pela energia em estado estacionário (seção 3.2.5) em função do passo da discretização h e pelo produto dos autovalores da matriz jacobiana (seção 3.2.6) em função de h .

4 *Resultados*

As implicações e considerações de discretização dos sistemas não-lineares foram obtidas por meio de simulações de dois sistemas conservativos, Hénon-Heiles (seção 2.4.1, p. 35) e Sprott-Nosé-Hoover (seção 2.4.2, p. 37), e são mostradas a seguir.

Este capítulo abordará ainda uma generalização sobre o critério de simplecticidade aplicado ao método de discretização proposto por Monaco e Normand-Cyrot.

4.1 Sistema Hénon-Heiles

4.1.1 Definição do nível de energia e da condição inicial

A condição inicial escolhida para fazer a simulação foi a mesma utilizada em (LETELLIER; AGUIRRE; MAQUET, 2005; LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007), ou seja:

$$(x_0, y_0, u_0, v_0) = (0,000; 0,670; 0,093; 0,000) \quad (4.1)$$

a qual resulta na energia:

$$H_0 = 0,128546999 \quad (4.2)$$

onde H_0 foi calculado com base na função Hamiltoniana definida para o sistema, dada pela eq. (2.34).

Como $H_0 < \frac{1}{6}$, deve-se obter uma trajetória caótica confinada dentro de um triângulo na superfície formada pelo plano xy (vide seção 2.4.1).

4.1.2 Seção de Poincaré característica do sistema contínuo

A seção de Poincaré gerada a partir da simulação com a condição inicial dada pela eq. (4.1) é mostrada na Figura 3. Neste emaranhado caótico, existem diversas ilhas, as

quais estão associadas a órbitas de períodos 1 a 5. A simetria, existente em sistemas conservativos, está presente em $v_n = 0$.

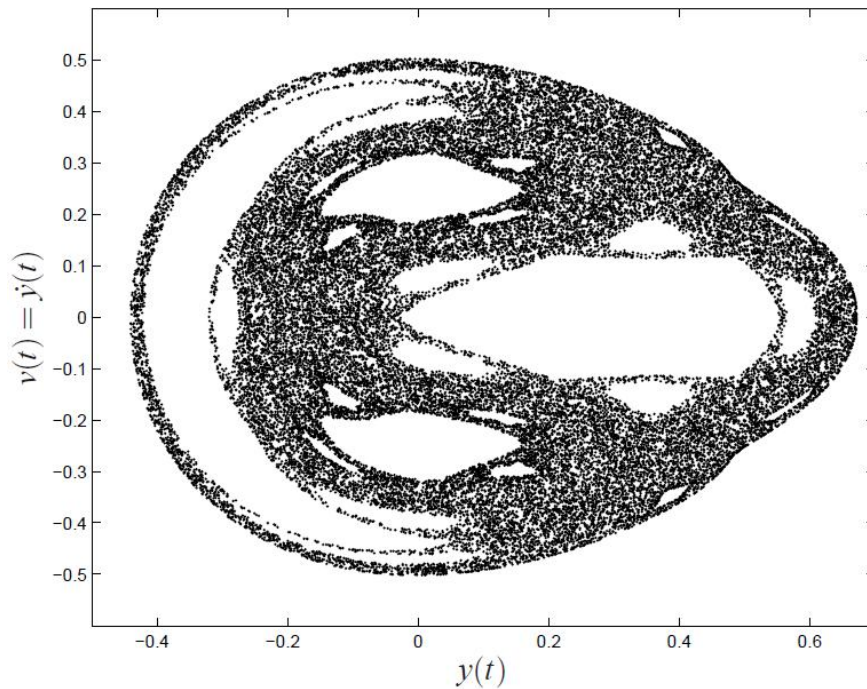


Figura 3: Seção de Poincaré do sistema Hénon-Heiles contínuo, definida por $P \equiv \{(y, u, v) \in \mathbb{R}^3 \mid x = 0, \dot{x} > 0\}$ com a condição inicial $(x_0 = 0,000; y_0 = 0,670; u_0 = 0,093; v_0 = 0,000)$. Simulação realizada utilizando o método de integração simplético Runge-Kutta com coeficientes Gauss-Legendre de ordem 6 e passo de integração $h = 0,001$ (HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006).

4.1.3 Análise da frequência do sistema contínuo

O espectro de Fourier da variável x do sistema Hénon-Heiles (Figura 4) mostra que a frequência máxima é $f_{max} \approx 0,75$ Hz. Portanto, aplicando-se a fórmula do cálculo do passo máximo da discretização, dada pela eq. (3.8), conclui-se que o passo dos modelos discretizados deverá ser menor do que $h_{max} = 0,67$ s para evitar instabilidades numéricas, bem como para que o atrator do modelo discretizado seja topologicamente equivalente ao atrator do sistema contínuo original.

4.1.4 Expoentes de Lyapunov e Dimensão de Kaplan-Yorke

A energia escolhida resulta em uma dinâmica caótica (seção 2.4.1). Portanto, é de se esperar que $\bar{\lambda}_1(t) \approx -\bar{\lambda}_4(t)$ e $\bar{\lambda}_2(t) \approx -\bar{\lambda}_3(t) \approx 0$. Os expoentes de Lyapunov do sistema

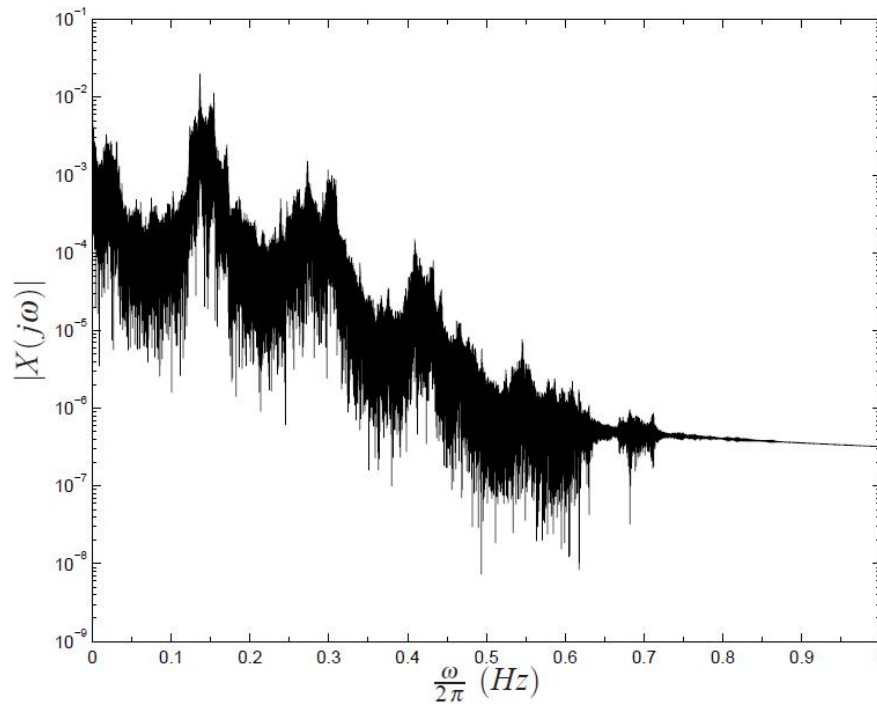


Figura 4: Frequências da variável x do sistema Hénon-Heiles contínuo, com as condições iniciais ($x_0 = 0,000$; $y_0 = 0,670$; $u_0 = 0,093$; $v_0 = 0,000$).

contínuo, calculados conforme a seção 3.2.4, resultam em:

$$\begin{cases} \lambda_1 = -1,0056749948974382 \\ \lambda_2 = -0,0760764825547922 \\ \lambda_3 = 0,0740062695376929 \\ \lambda_4 = 1,0077452079145501 \end{cases} \quad (4.3)$$

que mostra o constatado. Como $\sum_{j=1}^4 \lambda_j = 1,26565 \times 10^{-14} \approx 0$, o sistema é conservativo.

A dimensão de Kaplan-Yorke, calculada pela eq. (2.16), é dada por:

$$D_{KY} = 4,000000 \quad (4.4)$$

A dimensão de Kaplan-Yorke igual a 4, igual a dimensão n do sistema, também confirma a observação feita na seção 3.2.4 para sistemas conservativos.

Com relação à simetria dos expoentes, tem-se que $\lambda_1 \approx -\lambda_4$. Como $|\lambda_{1,4}| > 10 |\lambda_{2,3}|$, nota-se uma tendência para $\lambda_2 \approx -\lambda_3 \approx 0$, sugerindo uma dinâmica caótica (mencionado na seção 2.4.1 que deveria acontecer para este valor de energia).

4.1.5 Modelo discretizado pelo método de Mickens

Fazendo-se as alterações para a derivada discreta e aplicando-se as transformações sobre a parte direita das equações do sistema dado pela eq. (2.36), chega-se no seguinte modelo discretizado usando o método proposto por Mickens:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{u_{k+1}-u_k}{\phi} = -x_k - 2x_k y_k \\ \frac{v_{k+1}-v_k}{\phi} = -y_k + y_k^2 - x_k^2 \\ \frac{x_{k+1}-x_k}{\phi} = u_{k+1} \\ \frac{y_{k+1}-y_k}{\phi} = v_{k+1} \end{array} \right. \xrightarrow{\phi=h} \left\{ \begin{array}{l} u_{k+1} = u_k + h(-x_k - 2x_k y_k) \\ v_{k+1} = v_k + h(-y_k + y_k^2 - x_k^2) \\ x_{k+1} = x_k + h u_{k+1} \\ y_{k+1} = y_k + h v_{k+1} \end{array} \right. \quad (4.5)$$

onde utilizou-se $\phi = h$, eq. (2.54), atentando-se ao fato de que ϕ não pode ultrapassar o limite máximo (como apontado na seção 2.5.2) dado pelo critério de Nyquist, ou seja, $h_{max} = 0,67s$.

Simulações com este modelo para $h < 0,3s$, portanto $h < h_{max}$, geram soluções válidas, como mostrado em (LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007). A seção de Poincaré do modelo discretizado com $h = 0,02s$, mostrado na Figura 5 (item *a*), é praticamente igual à gerada pelo sistema contínuo original (Figura 3).

Quando o passo da discretização aumenta, a simetria é quebrada. Tal fato deve-se à impossibilidade de se estimar derivadas e variáveis ao mesmo tempo, quebrando a invariância no tempo no modelo discretizado. Considere, por exemplo, a seção de Poincaré do modelo discretizado com $h = 0,67s$, passo de discretização máximo sugerido pelo critério de Nyquist, mostrada na Figura 5, item *b*. Como era esperado, e também observado em (LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007), a simetria não é conservada.

A Tabela 1 mostra alguns valores para a energia, o produto dos autovalores da matriz jacobiana e os índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 para alguns valores do passo da discretização h . A média da energia é próxima do valor de energia original para passos de discretização h pequenos. Mas, assim que h aumenta, a energia também aumenta, sugerindo que o modelo começa a se comportar como um sistema expansivo. Tal fato pode ser constatado também graficamente, como mostra a Figura 6. O crescimento da energia assume uma forma aparentemente exponencial.

O produto dos autovalores da matriz jacobiana é igual a 1 para qualquer valor de h , como mostra a Figura 7. Esta falsa indicação da conservação de energia pode ser explicada pela análise da matriz jacobiana:

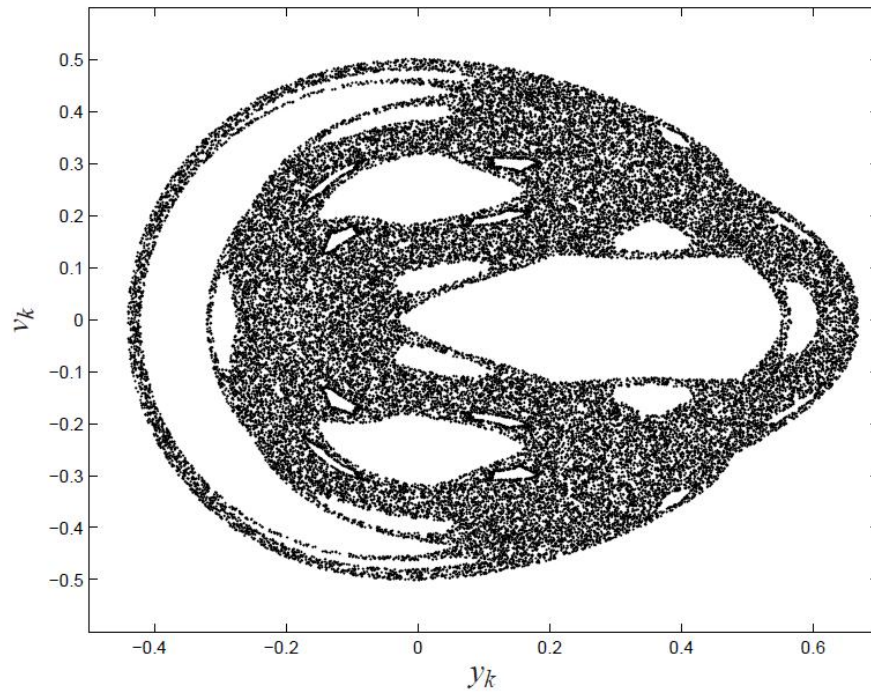
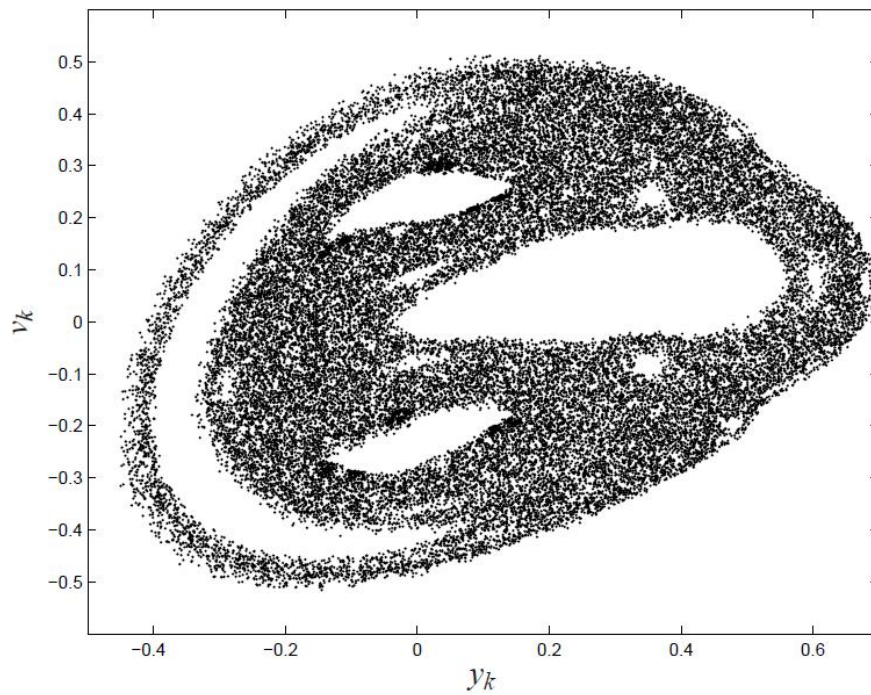
(a) $h = 0,02s$ (b) $h = 0,67s$

Figura 5: Seção de Poincaré do sistema Hénon-Heiles, definida por $P \equiv \{(y, u, v) \in \mathbb{R}^3 \mid x = 0, \dot{x} > 0\}$, usando o modelo discretizado pelo método proposto por Mickens com condição inicial $(x_0 = 0,000; y_0 = 0,670; u_0 = 0,093; v_0 = 0,000)$ e instante final da simulação $N \approx \frac{120000s}{h}$.

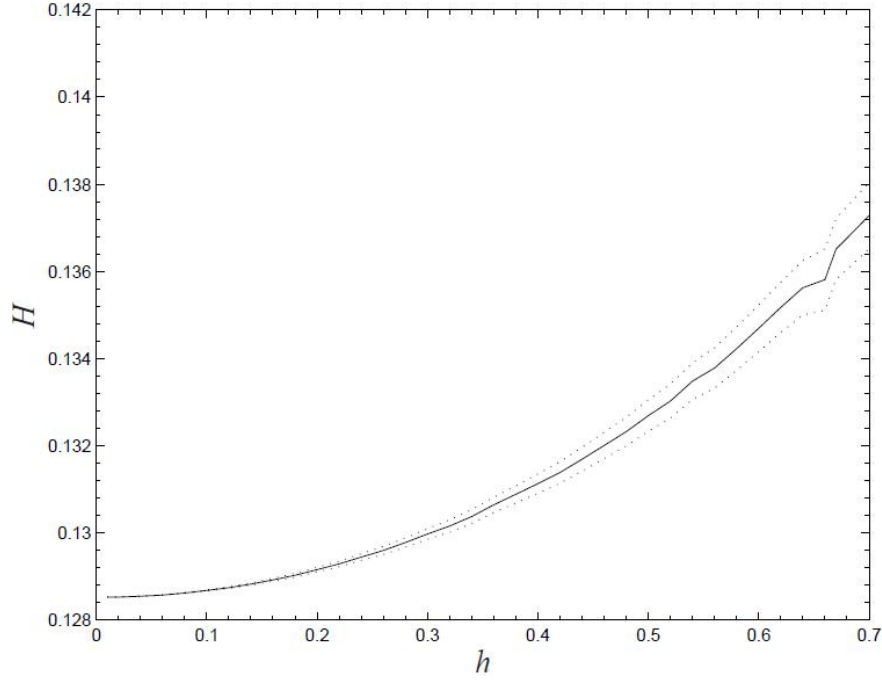


Figura 6: Energia em estado estacionário da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles em função do passo h

$$\begin{aligned}
 \begin{bmatrix} 1 & 0 & -h & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -h \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \frac{\partial (x_{k+1}, y_{k+1}, u_{k+1}, v_{k+1})}{\partial (x_k, y_k, u_k, v_k)} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ (-2y_k - 1)h & -2x_k h & 1 & 0 \\ -2x_k h & (2y_k - 1)h & 0 & 1 \end{bmatrix} \\
 \Rightarrow J_k^{Mickens} = \frac{\partial (x_{k+1}, y_{k+1}, u_{k+1}, v_{k+1})}{\partial (x_k, y_k, u_k, v_k)} &= \begin{bmatrix} 1 - h^2(2y_k + 1) & -2h^2 x_k & h & 0 \\ -2h^2 x_k & 1 + h^2(2y_k - 1) & 0 & h \\ -h(2y_k + 1) & -2h x_k & 1 & 0 \\ -2h x_k & h(2y_k - 1) & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.6)
 \end{aligned}$$

que possui $\det(J_k^{Mickens}) = 1$. Logo, o produto dos autovalores não depende de nenhuma variável ou do passo h .

O índice \mathcal{H}_1 mostra que a variação total da energia cresce pouco à medida que h aumenta. Isto significa que não ocorre variação significativa com relação ao valor inicial e final da simulação. Porém, o índice \mathcal{H}_2 evidencia que a energia varia cada vez mais em módulo por passo à medida que h aumenta. Conclui-se que ocorrem oscilações maiores de energia ao longo da simulação à medida que o passo aumenta, mas que, na média, mantem-se próximo ao valor da energia inicial. Graficamente, as variações destes dois

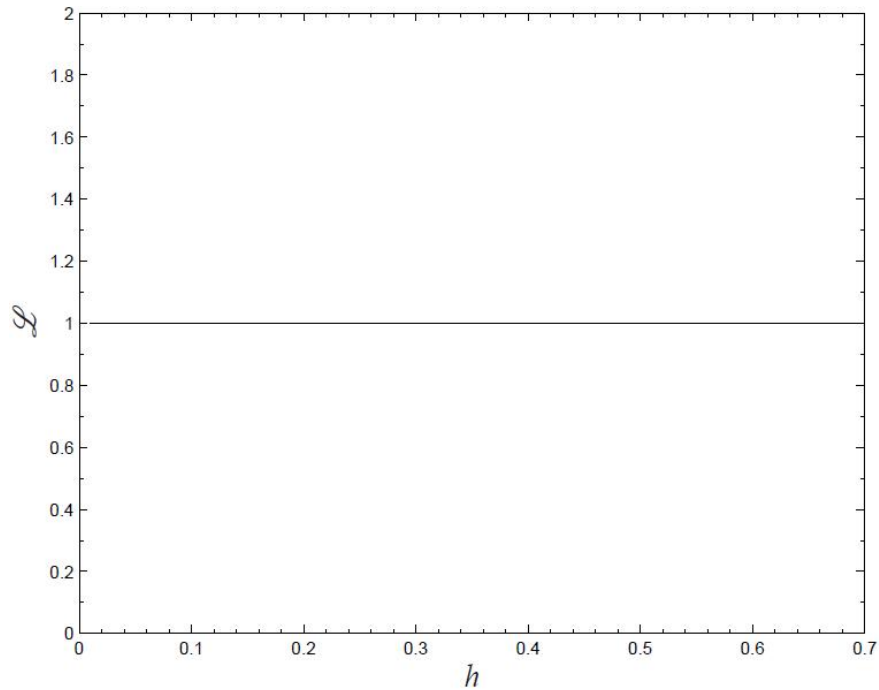


Figura 7: Produto dos autovalores da matriz jacobiana da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles em função do passo h . (—) $\mu_{\mathcal{L}}$; (⋯) $\mu_{\mathcal{L}} \pm \sigma_{\mathcal{L}}$.

índices são mostradas nas Figuras 8 e 9, que dão suporte às análises feitas anteriormente. \mathcal{H}_1 é praticamente zero para qualquer valor de h , enquanto \mathcal{H}_2 tem um crescimento quase linear à medida que h aumenta.

Tabela 1: Energia H , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles.

h	H		\mathcal{L}		\mathcal{H}_1	\mathcal{H}_2
	μ_H	σ_H	$\mu_{\mathcal{L}}$	$\sigma_{\mathcal{L}}$		
0,01	0,12852239	$1,218351 \times 10^{-7}$	1,00000	$1,9240 \times 10^{-30}$	$9,134468 \times 10^{-9}$	$6,893119 \times 10^{-4}$
0,02	0,12852654	$5,273372 \times 10^{-7}$	1,00000	$1,9896 \times 10^{-30}$	$2,279957 \times 10^{-7}$	$1,309897 \times 10^{-3}$
0,05	0,12855872	$3,387865 \times 10^{-6}$	1,00000	$1,9888 \times 10^{-30}$	$4,027389 \times 10^{-8}$	$3,176467 \times 10^{-3}$
0,30	0,12997370	$1,209762 \times 10^{-4}$	1,00000	$1,9046 \times 10^{-30}$	$7,560883 \times 10^{-8}$	$1,962283 \times 10^{-2}$
0,50	0,13268993	$3,574300 \times 10^{-4}$	1,00000	$1,8111 \times 10^{-30}$	$-3,637684 \times 10^{-7}$	$3,213178 \times 10^{-2}$
0,67	0,13651391	$6,963035 \times 10^{-4}$	1,00000	$1,8295 \times 10^{-30}$	$1,951520 \times 10^{-7}$	$4,276189 \times 10^{-2}$

Os expoentes de Lyapunov calculados para o modelo discretizado usando o método proposto por Mickens estão mostrados na Tabela 2. A simetria mostrada por \mathcal{S} , eq. (3.13), é quebrada significativamente a partir de $h > 0,3s$, instante em que as simulações começam a se descaracterizar e a perder a simetria temporal, como mencionado anteriormente e constatado em (LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007). O somatório dos expoentes é insignificante (da mesma ordem de grandeza do epsilon de máquina) para todos os valores do passo de discretização, o que o torna um falso indicador para a con-

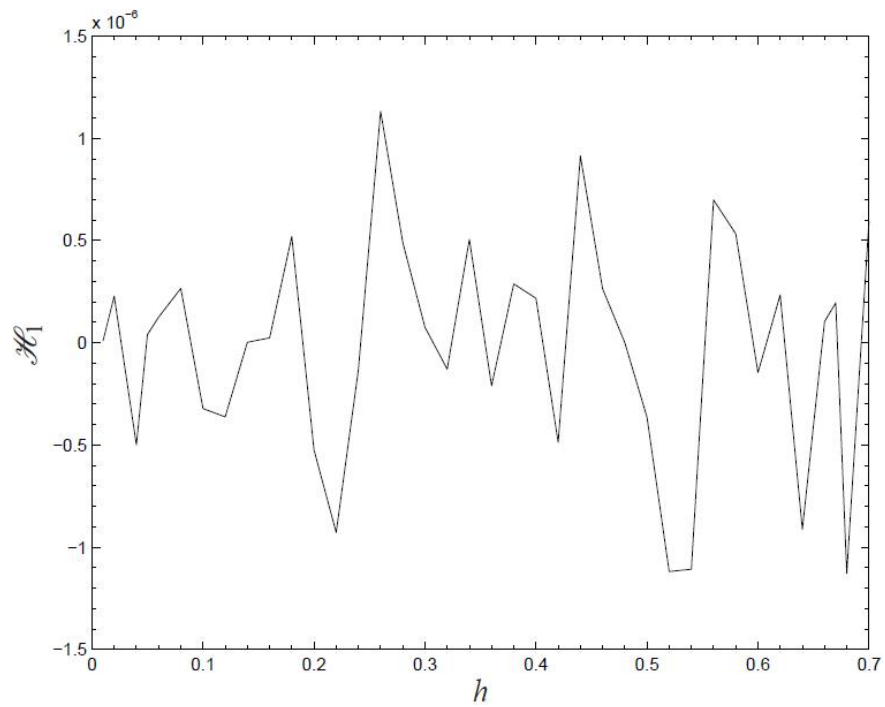


Figura 8: Índice \mathcal{H}_1 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles em função do passo h

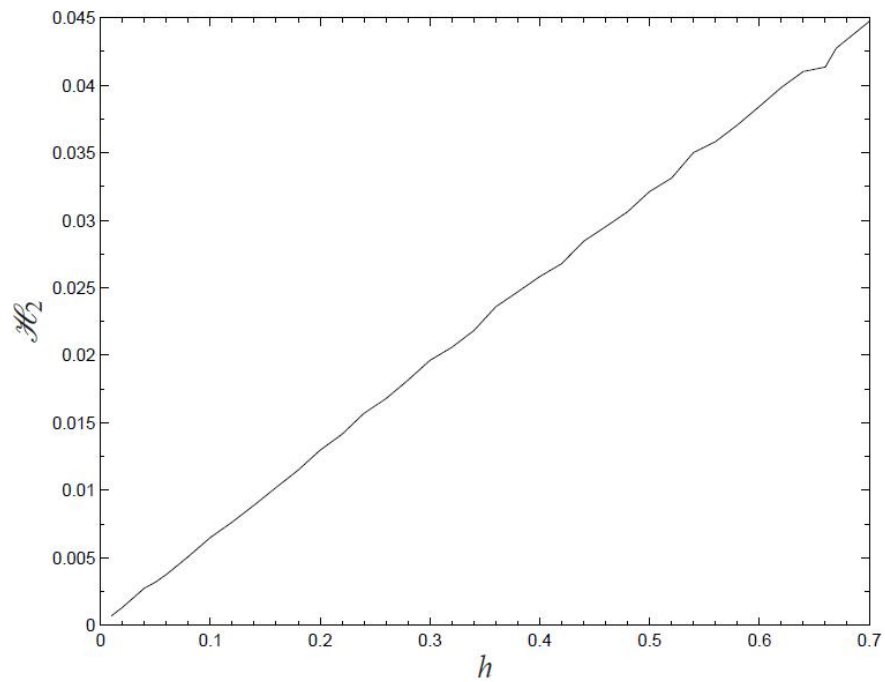


Figura 9: Índice \mathcal{H}_2 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles em função do passo h

servação da energia, pois ela não se conserva para valores elevados de h (Figura 6). Tal fato é causado pelo determinante igual a 1 para qualquer valor de h , mesma razão que

ocasionou a falsa indicação dada pelo produto dos autovalores da matriz jacobiana. A dimensão constante e igual a 4 para todos os valores de h é um resultado direto do somatório dos expoentes igual a zero. O valor dos expoentes de Lyapunov crescem em módulo à medida que h aumenta.

Tabela 2: Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Mickens do sistema Hénon-Heiles.

$h(s)$	$\lambda_1, \lambda_4, \lambda_2, \lambda_3$	$\mathcal{S} = \frac{\max(\lambda_i , \lambda_{5-i})}{\min(\lambda_i , \lambda_{5-i})}$	$\mathcal{V} = \sum_{i=1}^4 \lambda_i$	D_{KY}
0,0500	-0,0003227460	1,0000000054	$-6,24500451 \times 10^{-17}$	4,0000000000
	0,0003227460			
	-0,0003183800	1,0000000055		
	0,0003183800			
0,1000	-0,0012707197	1,0000003651	$-5,50774704 \times 10^{-17}$	4,0000000000
	0,0012707193			
	-0,0012020396	1,0000003859		
	0,0012020400			
0,1500	-0,0033021528	1,0000224910	$-2,68882139 \times 10^{-17}$	4,0000000000
	0,0033020785			
	-0,0031062338	1,0000239090		
	0,0031063080			
0,2000	-0,0056761365	1,0002442398	$-2,60208521 \times 10^{-18}$	4,0000000000
	0,0056747505			
	-0,0054891156	1,0002524996		
	0,0054905016			
0,3000	-0,0082089261	1,0055205697	$-4,51028104 \times 10^{-17}$	4,0000000000
	0,0082542441			
	-0,0080300326	1,0056755878		
	0,0079847146			
0,4000	-0,0100437649	1,0103371367	$5,55111512 \times 10^{-17}$	4,0000000000
	0,0099410034			
	-0,0095443563	1,0107667305		
	0,0096471178			
0,5000	-0,0069997091	1,1984607737	$1,82145965 \times 10^{-17}$	4,0000000000
	0,0083888768			
	-0,0062455068	1,2860524467		
	0,0048563391			

4.1.6 Modelo discretizado de ordem 3 pelo método de Monaco e Normand-Cyrot

Utilizando o método proposto por Monaco e Normand-Cyrot, descrito na seção 2.5.3, a discretização de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles, eq. (2.36), resulta no seguinte conjunto de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{k+1} = x_k + h u_k + \frac{h^2}{2} (-x_k - 2x_k y_k) \\ \quad + \frac{h^3}{6} [-u_k (2y_k + 1) - 2v_k x_k] \\ y_{k+1} = y_k + h v_k + \frac{h^2}{2} (-x_k^2 + y_k^2 - y_k) \\ \quad + \frac{h^3}{6} [v_k (2y_k - 1) - 2u_k x_k] \\ u_{k+1} = u_k + h (-x_k - 2x_k y_k) + \frac{h^2}{2} (-u_k (2y_k + 1) - 2v_k x_k) \\ \quad + \frac{h^3}{6} [(x_k + 2x_k y_k) (2y_k + 1) - 4u_k v_k + 2x_k (x_k^2 - y_k^2 + y_k)] \\ v_{k+1} = v_k + h (-y_k + y_k^2 - x_k^2) + \frac{h^2}{2} (v_k (2y_k - 1) - 2u_k x_k) \\ \quad + \frac{h^3}{6} [-2u_k^2 + 2v_k^2 + (2y_k - 1) (-x_k^2 + y_k^2 - y_k) - 2x_k (-x_k - 2x_k y_k)] \end{array} \right. \quad (4.7)$$

A simulação do modelo discretizado de ordem 3, eq. (4.7), consegue reproduzir a seção de Poincaré similar a do sistema original para um passo h pequeno (Figura 10). Observe que tanto a simetria, quanto as ilhas características do sistema original são mantidas. Para valores de h um pouco maiores ($h > 0,02s$) e à medida que h cresce, instabilidades numéricas começam a ocorrer, resultando em uma seção de Poincaré com pontos aglomerados convergindo para o ponto-fixa da origem, conforme observado em (LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007).

O gráfico da energia em estado estacionário em função do passo h (Figura 11) mostra que a energia não se conserva à medida que h aumenta. Isto explica o porquê dos pontos convergirem para a origem. Os valores da média e do desvio padrão da energia são mostrados para algumas simulações na Tabela 3. Até $h = 0,02s$, a energia altera muito pouco.

A Tabela 3 mostra que o valor do produto dos autovalores da matriz jacobiana é bem próximo de 1 para valores baixos de h , indicando que o sistema é conservativo neste intervalo. Analisando-se a variação gráfica do produto (Figura 12), pode-se notar um decaimento do produto dos autovalores, indicando também que a energia não é conservada. Como $\sigma_{\mathcal{L}} \approx 0, \forall h$, conclui-se que não ocorre uma variação significativa dos produtos dos autovalores ao longo das simulações. O produto dos autovalores não é constante e igual a

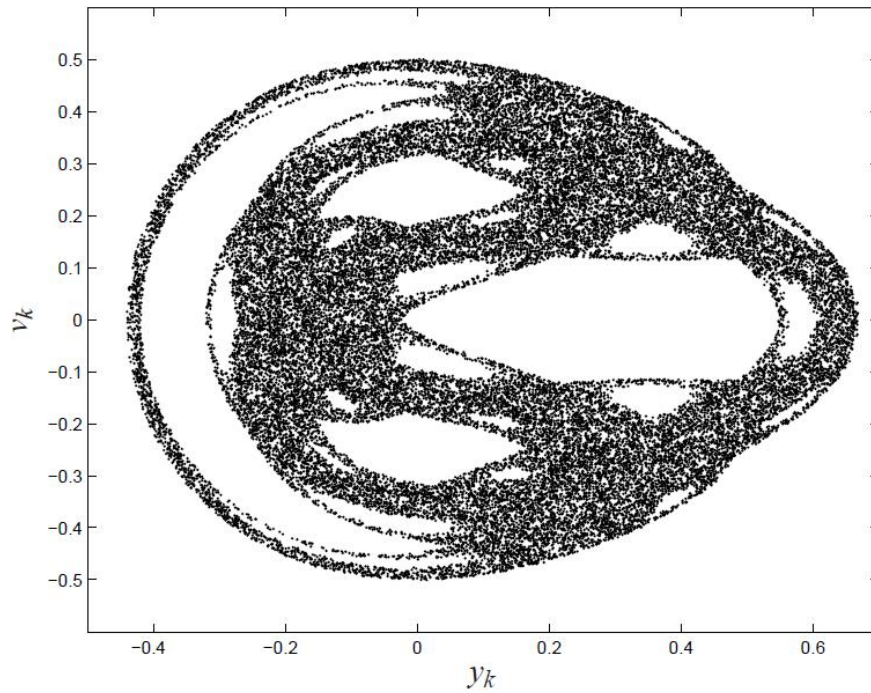


Figura 10: Seção de Poincaré do sistema Hénon-Heiles, definida por $P \equiv \{(y, u, v) \in \mathbb{R}^3 \mid x = 0, \dot{x} > 0\}$, usando o modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$, eq. (4.7), com condição inicial $(x_0 = 0,000; y_0 = 0,670; u_0 = 0,093; v_0 = 0,000)$, $h = 0,01s$ e instante final da simulação $N \approx \frac{120000s}{h}$.

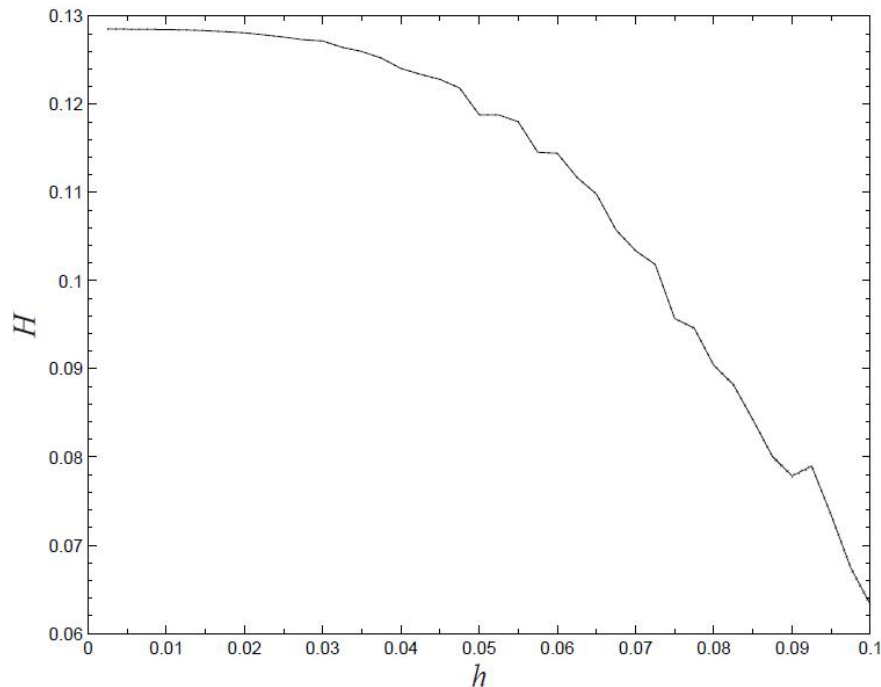


Figura 11: Energia em estado estacionário da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h

1 para todos valores de h devido a estrutura da matriz jacobiana do modelo de ordem 3:

$$\begin{aligned}
 J_k^{MNC, \eta=3} = \frac{\partial(x_{k+1}, y_{k+1}, u_{k+1}, v_{k+1})}{\partial(x_k, y_k, u_k, v_k)} = & \begin{bmatrix} 1 - \frac{h^3 v}{3} - \frac{h^2(2y+1)}{2} & \dots & \dots \\ -\frac{uh^3}{3} - xh^2 & \dots & \dots \\ \frac{h^3(2y+(2y+1)^2+6x^2-2y^2)}{6} - h^2 v - h(2y+1) & \dots & \dots \\ \frac{h^3(2x-2x(2y-1)+2x(2y+1)+4xy)}{6} - h^2 u - 2hx & \dots & \dots \end{bmatrix} \\
 \dots & \dots \\
 \dots & \begin{bmatrix} -\frac{uh^3}{3} - xh^2 & h - \frac{h^3(2y+1)}{6} & -\frac{h^3 x}{3} \\ \frac{h^2(2y-1)}{2} + \frac{h^3 v}{3} + 1 & -\frac{h^3 x}{3} & h + \frac{h^3(2y-1)}{6} \\ \frac{h^3(2x-2x(2y-1)+2x(2y+1)+4xy)}{6} - h^2 u - 2hx & 1 - \frac{2h^3 v}{3} - \frac{h^2(2y+1)}{2} & -\frac{2uh^3}{3} - xh^2 \\ \frac{h^3((2y-1)^2-2y+2x^2+2y^2)}{6} + h^2 v + h(2y-1) & -\frac{2uh^3}{3} - xh^2 & \frac{h^2(2y-1)}{2} + \frac{2h^3 v}{3} + 1 \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

a qual possui $\det(J_k^{MNC, \eta=3}) = 1 + \mathcal{O}(h^{12})$, fazendo com que o produto dos autovalores varie com h . Por causa disto, este indicador mostra corretamente a variação da energia em função do passo h .

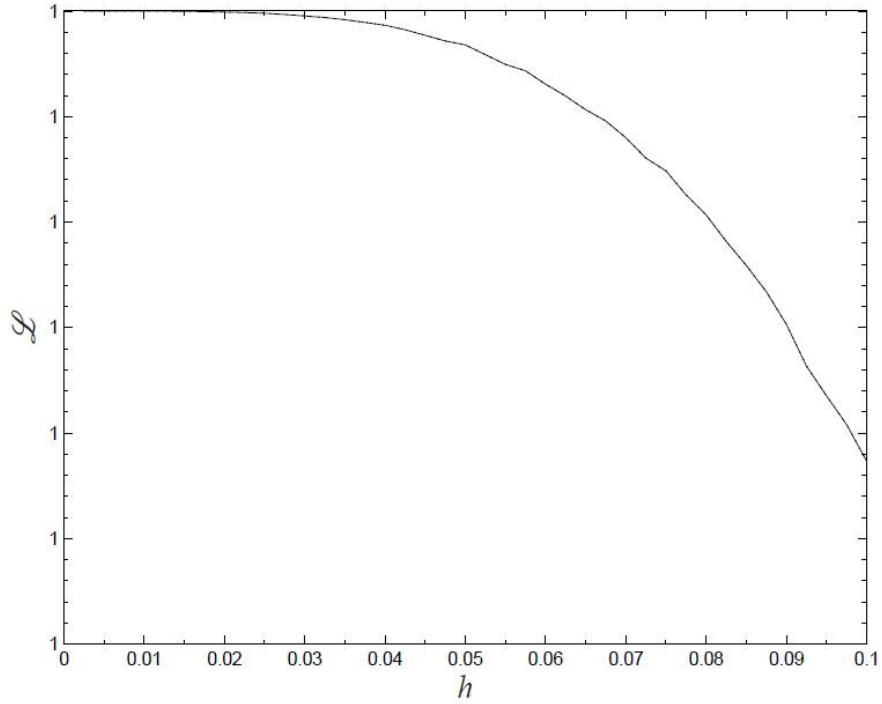


Figura 12: Produto dos autovalores da matriz jacobiana da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h . (—) $\mu_{\mathcal{L}}$; (⋯) $\mu_{\mathcal{L}} \pm \sigma_{\mathcal{L}}$.

A variação dos índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 em função de h é mostrada graficamente nas Figuras 13 e 14. Alguns valores exatos estão na Tabela 3. O índice \mathcal{H}_1 é baixo, sendo da mesma ordem de grandeza do modelos discretizado proposto por Mickens. Nota-se que o índice \mathcal{H}_2 apresenta um melhor resultado, pois $\mathcal{H}_2 = 5,581179 \times 10^{-6}$ em $h = 0,10$ s, enquanto para o modelo de Mickens $\mathcal{H}_2 = 6,493478 \times 10^{-3}$ em $h = 0,10$ s. Porém, o modelo proposto por Mickens consegue atingir passos de discretização mais elevados sem ficar instável, apesar de não conseguir manter a simetria nestes casos.

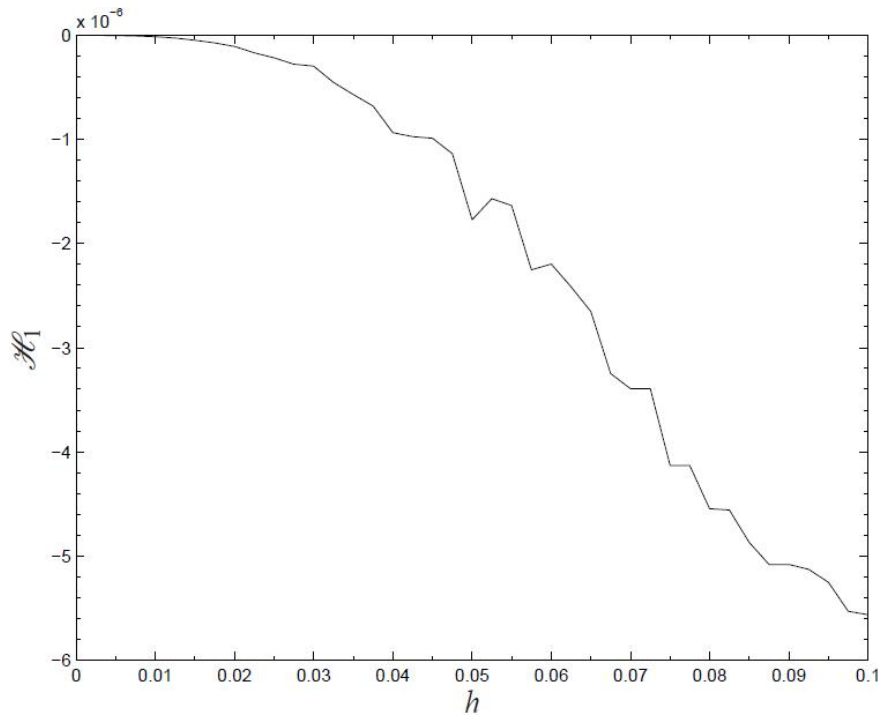


Figura 13: Índice \mathcal{H}_1 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h

Tabela 3: Energia H , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 3 do sistema Hénon-Heiles.

h	H		\mathcal{L}		\mathcal{H}_1	\mathcal{H}_2
	μ_H	σ_H	$\mu_{\mathcal{L}}$	$\sigma_{\mathcal{L}}$		
0,01	0,12847379	$1,6532 \times 10^{-11}$	0,9999999	$4,6517 \times 10^{-19}$	$-1,416160 \times 10^{-8}$	$1,428825 \times 10^{-8}$
0,02	0,12810173	$3,8226 \times 10^{-9}$	0,9999999	$1,3528 \times 10^{-16}$	$-1,072006 \times 10^{-7}$	$1,090057 \times 10^{-7}$
0,05	0,11881591	$6,5307 \times 10^{-6}$	0,9999984	$1,0947 \times 10^{-13}$	$-1,770842 \times 10^{-6}$	$1,770842 \times 10^{-6}$
0,10	0,06328212	$2,5124 \times 10^{-4}$	0,9999786	$1,2893 \times 10^{-11}$	$-5,564622 \times 10^{-6}$	$5,581179 \times 10^{-6}$

Os expoentes de Lyapunov calculados para o modelo de ordem 3 estão mostrados na Tabela 4. Assim como obtido no resultado para o modelo discretizado por Mickens, os expoentes de Lyapunov para o modelo Monaco e Normand-Cyrot (MNC) de ordem

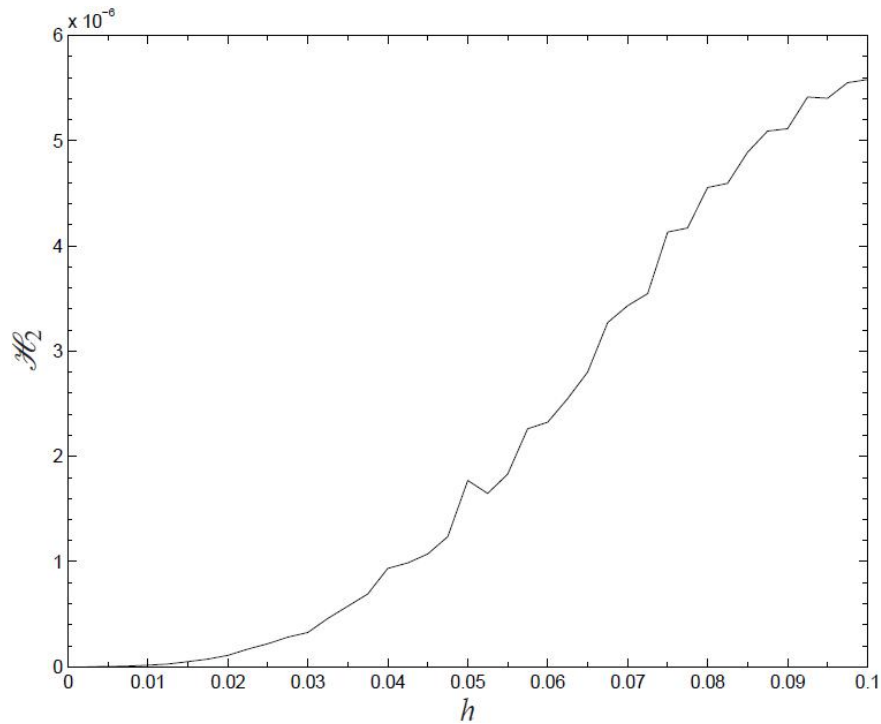


Figura 14: Índice \mathcal{H}_2 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h

3 também crescem em módulo à medida que o passo de discretização aumenta. Tanto o somatório dos expoentes de Lyapunov, quanto a dimensão não se mantêm à medida que h aumenta. Isto pode ser observado graficamente nas Figuras 15 e 16. O somatório dos expoentes de Lapunov começa a se distanciar do zero, indicando que o sistema está começando a deixar de se comportar como conservativo. A dimensão e o somatório dos expoentes começam a decair também a partir de $h \approx 0,02s$, ficando cada vez mais longe dos valores que deveriam permanecer constantes. É válido ressaltar que a similaridade com a seção de Poincaré do sistema contínuo, bem como a conservação da energia (Figura 11), se mantêm até este valor do passo de discretização. O decaimento de ambos os gráficos aproxima-se do decaimento do gráfico do produto dos autovalores da matriz jacobiana. Portanto, neste caso, o somatório dos expoentes acompanha o comportamento do produto dos autovalores e da energia, e o somatório dos expoentes de Lyapunov pode ser usado como um indicador da conservação da energia. Não se pode afirmar o mesmo sobre a dimensão, mas certamente ela pode funcionar como um indicador da qualidade do modelo.

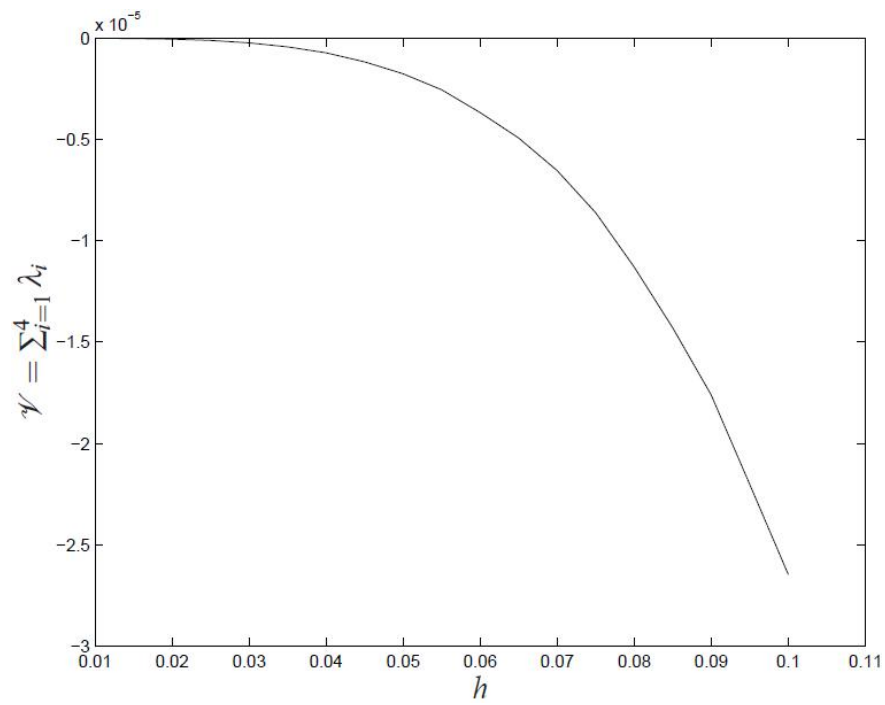


Figura 15: Somatório dos expoentes de Lyapunov para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h .

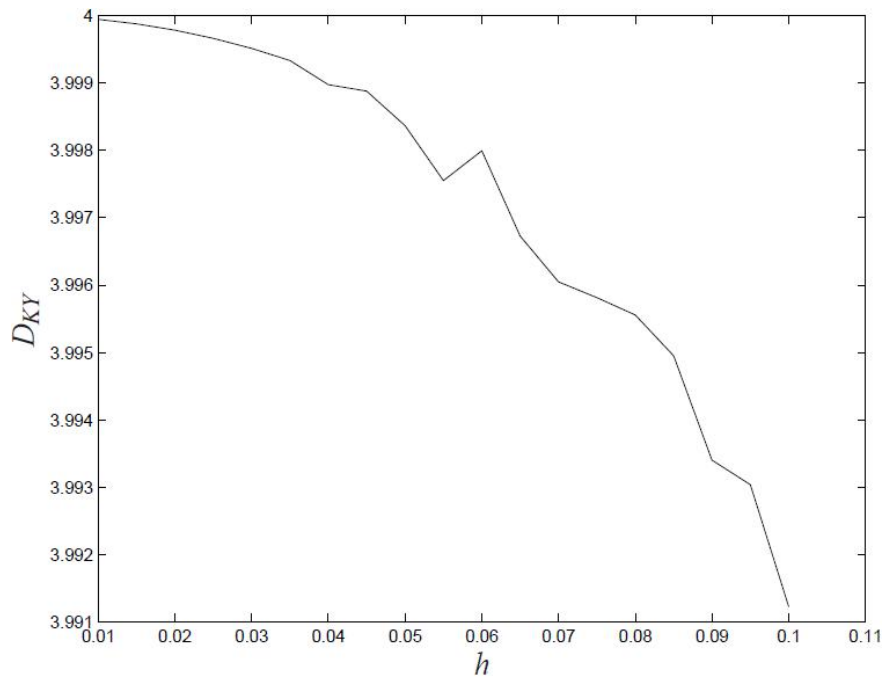


Figura 16: Dimensão de Kaplan-Yorke para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h .

Tabela 4: Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 3 do sistema Hénon-Heiles.

$h(s)$	$\lambda_1, \lambda_4, \lambda_2, \lambda_3$	$\mathcal{S} = \frac{\max(\lambda_i , \lambda_{5-i})}{\min(\lambda_i , \lambda_{5-i})}$	$\mathcal{V} = \sum_{i=1}^4 \lambda_i$	D_{KY}
0,0100	-0,0000534734	1,0000349846	$-2,89079723 \times 10^{-9}$	3,9999459395
	0,0000534715			
	-0,0000199868	1,0000510419		
	0,0000199858			
0,0200	-0,0002172234	1,0001414876		
	0,0002171926			
	-0,0000772974	1,0002014000		
	0,0000772818			
0,0300	-0,0004836085	1,0003177535		
	0,0004834548			
	-0,0001758193	1,0004567792		
	0,0001757390			
0,0500	-0,0010775999	1,0004838015		
	0,0010770788			
	-0,0006462093	1,0019188487		
	0,0006449717			
0,0750	-0,0020500954	1,0006551064		
	0,0020487532			
	-0,0015166705	1,0048100701		
	0,0015094101			
0,1000	-0,0030162748	1,0002190448		
	0,0030169355			
	-0,0029186276	1,0093821018		
	0,0028914993			

4.1.7 Modelo discretizado pelo método de Monaco e Normand-Cyrot com escolha de termos

Letellier, Mendes e Mickens (2007) escolhem termos da eq. (2.67) a fim de que o traço da matriz jacobiana fique igual a 4, independentemente do valor de h , a fim de se conservar a energia para valores pequenos de h , como nos mostra a eq. (2.9). E ainda em (LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007), foi verificado que o traço da matriz jacobiana do modelo discretizado de ordem 2 é igual a $4 - 2h^2$, e o de ordem 3 continua sendo igual a $4 - 2h^2$. Portanto, eliminando-se o termo de ordem 2 do modelo discretizado de ordem 3 tenderia a melhorar a resposta, pois o traço seria exatamente igual a 4. Simulações mostraram que, ainda assim, os resultados não são satisfatórios, pois levaram o modelo à instabilidade.

Inicialmente, tentou-se aplicar o mesmo raciocínio neste trabalho para evitar o problema de estabilidade e perda de simetria. Para tanto, estudou-se a variação do traço da matriz jacobiana do sistema Hénon-Heiles, para cada incremento na ordem de discre-

tização. O acréscimo no traço de cada modelo discretizado de ordem η , calculado pela eq. (3.22), para o sistema Hénon-Heiles estão resumidos na Tabela 4.1.7. Somente são mostrados os acréscimos para as discretizações até de ordem 7, pois os termos superiores são demasiadamente longos e desprezíveis.

Tabela 5: Acréscimos no traço da matriz jacobiana, dado pela eq. (3.22), para o sistema Hénon-Heiles

η	Acréscimo no traço - $\Delta tr\{J_\eta\}$
1	4
2	$-2h^2$
3	0
4	$\frac{h^4(4x^2+4y^2+1)}{6}$
5	$\frac{h^5(2(ux+vy))}{3}$
6	$\frac{h^6(28u^2+28v^2-120x^2y-52x^2+40y^3-52y^2-1)}{180}$
7	$-\frac{h^7(19vx^2+38uxy+20ux-19vy^2+20vy)}{90}$

O próximo passo foi tentar conjugar o acréscimo de alguns termos de ordem superior levando em consideração o traço da matriz jacobiana. Usando-se os valores de (x, y, u, v) da simulação do sistema contínuo pelo método de Runge-Kutta a cada 0,02s, tem-se que $\Delta tr\{J_4\} \sim 10^{-8}$, $\Delta tr\{J_5\} \sim 10^{-10}$, $\Delta tr\{J_6\} \sim 10^{-12}$ e $\Delta tr\{J_7\} \sim 10^{-14}$. Escolheu-se então o modelo discretizado de ordem 3, por saber que o mesmo consegue reproduzir o sistema Hénon-Heiles original para $h < 0,02s$, acrescido dos termos de ordem 6 e 7, por causa de sua pouca representatividade no traço. Dessa forma, fez-se uma nova simulação com termos escolhidos, o modelo discretizado de ordem 7 sem os termos de ordem 4 e 5. O modelo com termos escolhidos se apresenta bem mais robusto do que o modelo de ordem 3, pois conseguiu reproduzir a seção de Poincaré do sistema Hénon-Heiles original até $h \approx 0,4s$.

A Tabela 6 mostra os índices calculados para as simulações com o modelo com os termos escolhidos. Para $h = 0,02s$, o modelo com os termos escolhidos chegou bem mais próximo do valor da energia do que o modelo de ordem 3, pois conseguiu uma energia igual a 0,12852016 (0,02% de erro em relação ao valor da energia do sistema contínuo), enquanto o modelo de ordem 3 conseguiu uma energia igual a 0,12852016 (0,35% de erro em relação ao valor da energia do sistema contínuo). O média do produto dos autovalores \mathcal{L} ficou mais próximo de 1,000 com um desvio padrão bem menor para todos dos valores de passo de discretização quando comparado com os outros modelos. Os índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 , que medem a variação da energia por instante k em um dado período, também foram bem melhores para o modelo com os termos escolhidos.

Tabela 6: Energia H , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot com termos escolhidos (ordem 7, sem os termos de ordem 4 e 5) do sistema Hénon-Heiles.

h	H		\mathcal{L}		\mathcal{H}_1	\mathcal{H}_2
	μ_H	σ_H	$\mu_{\mathcal{L}}$	$\sigma_{\mathcal{L}}$		
0,01	0,12852016	$1,3560 \times 10^{-27}$	0,999999	$7,9242 \times 10^{-19}$	$1,817362 \times 10^{-16}$	$9,972845 \times 10^{-15}$
0,02	0,12852016	$2,6559 \times 10^{-27}$	0,999999	$1,7883 \times 10^{-16}$	$-3,207306 \times 10^{-16}$	$4,931968 \times 10^{-15}$
0,05	0,12852016	$5,2270 \times 10^{-21}$	0,999998	$2,0292 \times 10^{-13}$	$-1,956749 \times 10^{-13}$	$6,887361 \times 10^{-13}$
0,10	0,12852012	$3,3050 \times 10^{-16}$	0,999972	$4,9349 \times 10^{-11}$	$-2,526691 \times 10^{-11}$	$8,537719 \times 10^{-11}$
0,20	0,12851090	$1,8055 \times 10^{-11}$	0,999572	$1,4636 \times 10^{-8}$	$-2,925155 \times 10^{-9}$	$1,011578 \times 10^{-8}$
0,30	0,12831026	$1,0259 \times 10^{-8}$	0,997942	$3,8003 \times 10^{-7}$	$-4,706569 \times 10^{-8}$	$1,446542 \times 10^{-7}$
0,40	0,12678734	$7,6243 \times 10^{-7}$	0,993919	$4,1918 \times 10^{-6}$	$-3,022480 \times 10^{-7}$	$8,765348 \times 10^{-7}$
0,50	0,12062185	$1,5770 \times 10^{-5}$	0,986659	$2,5672 \times 10^{-5}$	$-1,100747 \times 10^{-6}$	$3,153563 \times 10^{-6}$
0,60	0,10690496	$1,0963 \times 10^{-4}$	0,975900	$1,0731 \times 10^{-4}$	$-2,385276 \times 10^{-6}$	$7,236399 \times 10^{-6}$
0,67	0,09856538	$1,8135 \times 10^{-4}$	0,965865	$3,4256 \times 10^{-4}$	$-2,832504 \times 10^{-6}$	$1,376200 \times 10^{-5}$
0,70	0,08665434	$2,9305 \times 10^{-4}$	0,962689	$3,1461 \times 10^{-4}$	$-3,500137 \times 10^{-6}$	$1,121393 \times 10^{-5}$

A introdução alguns termos de alta ordem no modelo levou a uma melhora nos resultados, pois se conseguiu atingir passos de discretização maiores ainda mantendo as mesmas características do sistema contínuo original. A seguir, será verificado se é possível melhorar a solução ao considerar todos os termos da expansão da eq. (2.67). Apesar do traço da matriz jacobiana não se manter constante, acredita-se que o modelo discretizado considerando todos os termos pode ser uma melhor aproximação.

4.1.8 Modelo discretizado de ordem 9 pelo método de Monaco e Normand-Cyrot

Somente usando o processo de discretização (sem a escolha de termos), obteve-se o modelo discretizado de ordem 9, e simulou-se novamente o sistema. O modelo discretizado de ordem 9 apresenta-se bem mais robusto do que os apresentados anteriormente. Para valores menores do que $h \approx 0,5s$, a seção de Poincaré é praticamente igual à do sistema original.

A fim de investigar o quão robusta é tal discretização, gerou-se três gráficos em função do passo h : corte em $v_k = 0$ da seção de Poincaré, definida pela eq. (2.37), em função do passo h ; corte em $y_k = 0$ da seção de Poincaré, definida pela eq. (2.37), em função do passo h ; energia em estado estacionário em função do passo h ; e produto dos autovalores da matriz jacobiana em função do passo h . No corte em $v_k = 0$ da seção de Poincaré, pegou-se os pontos da seção de Poincaré em que $-0,01 \leq v_k \leq 0,01$ fosse verificado, conforme explicação da seção 3.2.9. Raciocínio análogo foi aplicado para o corte em $y_k = 0$ da seção de Poincaré, pegando-se os pontos em que $-0,01 \leq y_k \leq 0,01$ fosse verificado. Para obter a

energia em estado estacionário e o produto dos autovalores, utilizou-se os dez mil últimos instantes k da simulação. Os gráficos em questão para o modelo discretizado de ordem 9, sem termos escolhidos, são mostrados nas Figuras 17, 18, 19 e 20.

Pela região *I* das Figuras 17 e 18, percebe-se que para $h \leq 0,5s$, as ilhas da seção de Poincaré são as mesmas das do sistema original. A região *I* do gráfico da energia (Figura 19) mostra que a energia é praticamente constante, resultando em um atrator igual ao original. E, ainda, a Figura 20 mostra que o produto dos autovalores da matriz jacobiana nesta região é aproximadamente constante e igual a $1,0$, sugerindo que o modelo é conservativo. A seção de Poincaré para $h = 0,5s$ é mostrada na Figura 21 (item *a*).

Para $h > 0,5s$, começa a haver o fechamento das ilhas (flagrado na região *II* da Figura 18). A região *II* do gráfico da energia (Figura 19) mostra que se inicia uma variação representativa da energia, resultando em um atrator equivalente, mas com algumas diferenças. Em $h = 0,67s$, caso em que a energia é igual a $0,122$ (5% da energia inicial), o modelo ainda continua tendo uma resposta topologicamente equivalente a do sistema original.

Para $h > 0,67s$, comportamento espúrio e instabilidades numéricas começam a ocorrer, como é de se esperar, pois se está acima da frequência de Nyquist. A região *III* do gráfico

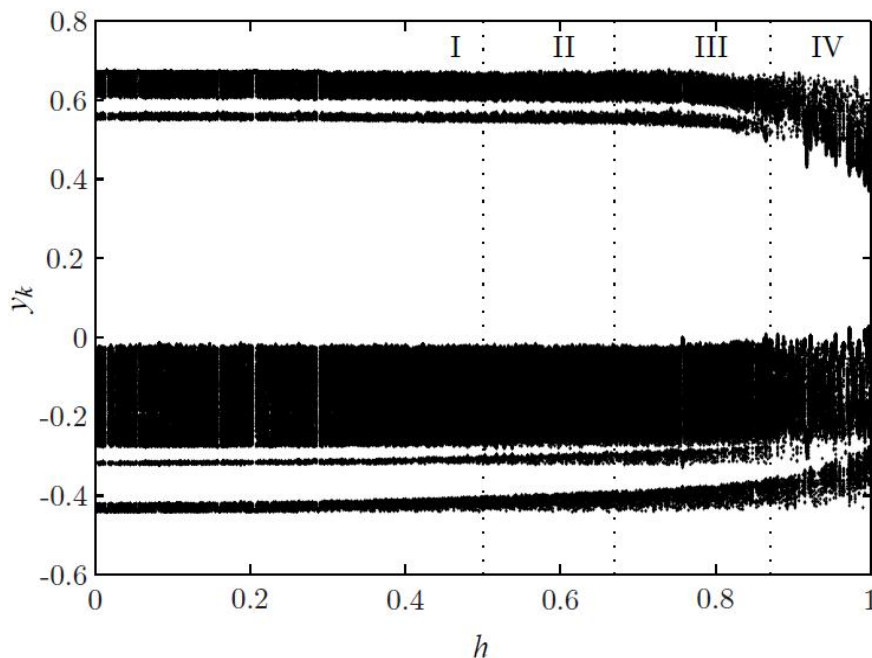


Figura 17: Corte em $v_k = 0$ da seção de Poincaré, definida pela eq. (2.37), da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ de Hénon-Heiles em função do passo h . Tem-se o atrator do modelo discretizado de ordem 9 na região (*I*) semelhante ao atrator do sistema contínuo ($0s < h \leq 0,5s$); (*II*) levemente menor que o atrator do sistema contínuo ($0,5s < h \leq 0,67s$); (*III*) sem alguns detalhes e com algumas instabilidades numéricas, devido a h superior a frequência de Nyquist ($0,67s < h \leq 0,87s$); (*IV*) com predomínio de instabilidades numéricas ($h > 0,87s$).

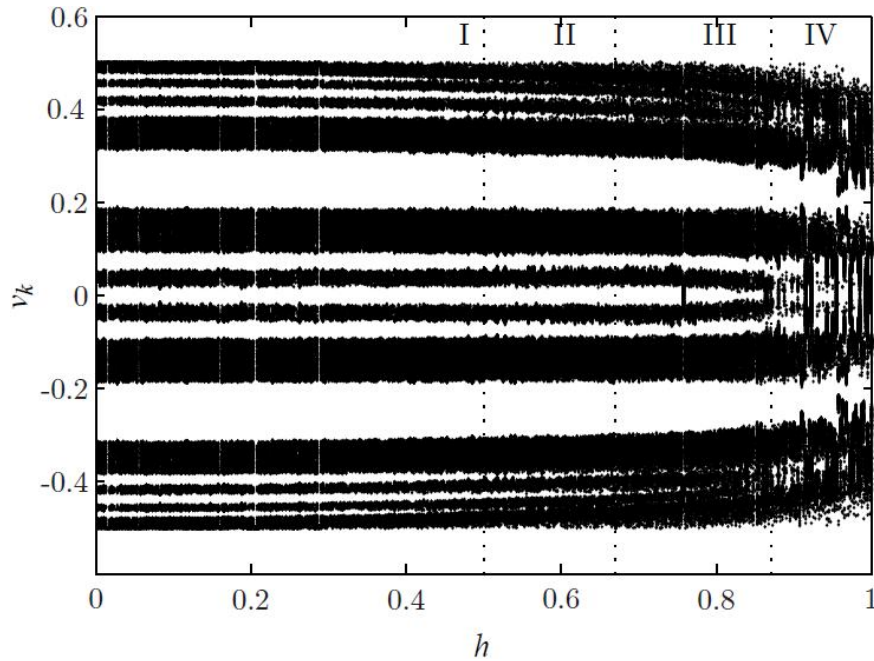


Figura 18: Corte em $y_k = 0$ da seção de Poincaré, definida pela eq. (2.37), da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ de Hénon-Heiles em função do passo h . Tem-se o atrator do modelo discretizado de ordem 9 na região (I) semelhante ao atrator do sistema contínuo ($0s < h \leq 0,5s$); (II) equivalente ao atrator do sistema contínuo, com poucas diferenças ($0,5s < h \leq 0,67s$); (III) sem alguns detalhes e com algumas instabilidades numéricas, devido a h superior a frequência de Nyquist ($0,67s < h \leq 0,87s$); (IV) com predomínio de instabilidades numéricas ($h > 0,87s$).

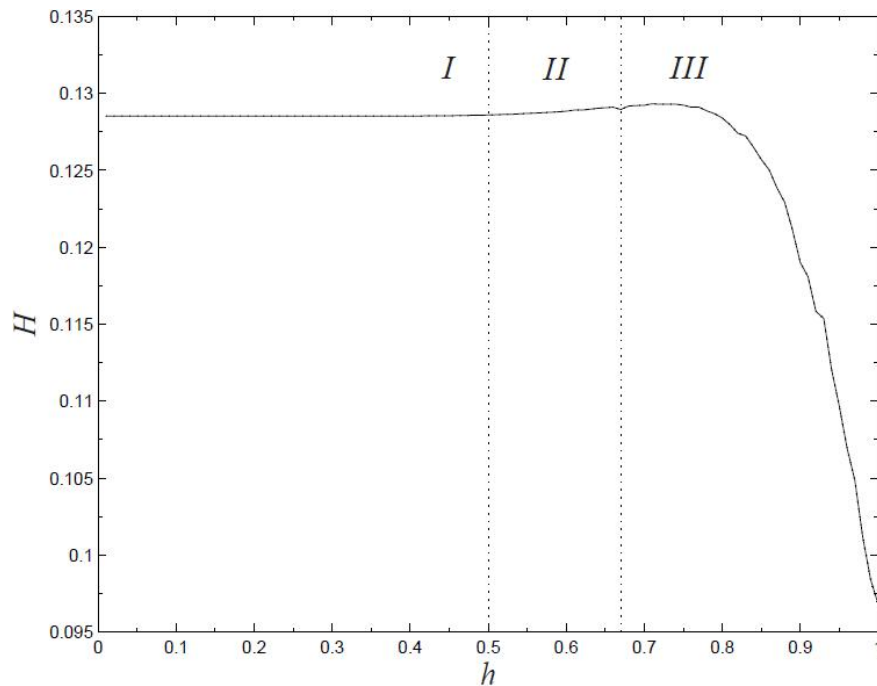


Figura 19: Energia em estado estacionário da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h . Na região (I) a energia é praticamente constante, resultando em um atrator do modelo discreto semelhante ao atrator do sistema contínuo ($0s < h \leq 0,5s$); (II) ocorre pequenas variações da energia, resultando em um atrator um pouco diferente ($0,5s < h \leq 0,67s$); (III) a energia decai excessivamente a medida que h aumenta, resultando em atratores desfigurados ($h > 0,67s$).

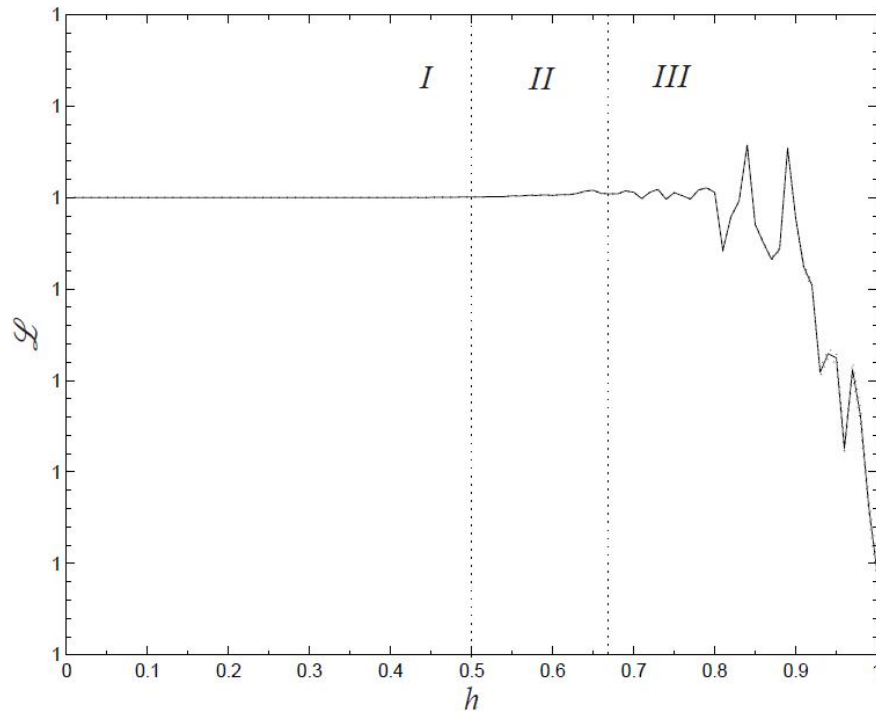


Figura 20: Produto dos autovalores da matriz jacobiana da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h . Na região (I) o produto é praticamente constante, resultando em um atrator do modelo discreto semelhante ao atrator do sistema contínuo ($0s < h \leq 0,5s$); (II) ocorre pequenas variações do produto, resultando em um atrator um pouco diferente ($0,5s < h \leq 0,67s$); (III) o produto decai excessivamente a medida que h aumenta, resultando em atratores desfigurados ($h > 0,67s$). (—) $\mu_{\mathcal{L}}$; (⋯) $\mu_{\mathcal{L}} \pm \sigma_{\mathcal{L}}$.

da energia (Figura 19) mostra que uma perda drástica da energia a medida que h aumenta. A não conservação pode ser observada também no gráfico do produto dos autovalores da matriz jacobiana em função de h (Figura 20), no qual se pode notar um distanciamento do valor 1,0 nesta região. Os cortes na seção de Poincaré (Figuras 17 e 18) mostram que, para $0,67s < h \leq 0,87s$, alguns detalhes da seção de Poincaré são perdidos. Porém, a simetria ainda permanece, como pode ser percebido na seção de Poincaré para $h = 0,87s$ (Figura 21, item *b*). Somente a partir de $h \approx 0,87s$ é que as instabilidades numéricas predominam, o que pode ser notado pelo excesso de mudanças bruscas no retrato da seção de Poincaré (região IV da Figura 18).

O produto dos autovalores da matriz jacobiana decai suavemente à medida que o passo da discretização aumenta, como pode ser visto pela Figura 20. Mas este decaimento é muito mais suave do que o do modelo de ordem 3. Para o modelo de ordem 3, o produto é igual a 0,996 em $h = 0,4s$. Enquanto que para o modelo de ordem 9, o produto é igual a 0,9997 em $h = 1,0s$. Assim, o modelo de ordem mais alta apresenta-se mais conservativo do que o de ordem mais baixa para passos mais elevados.

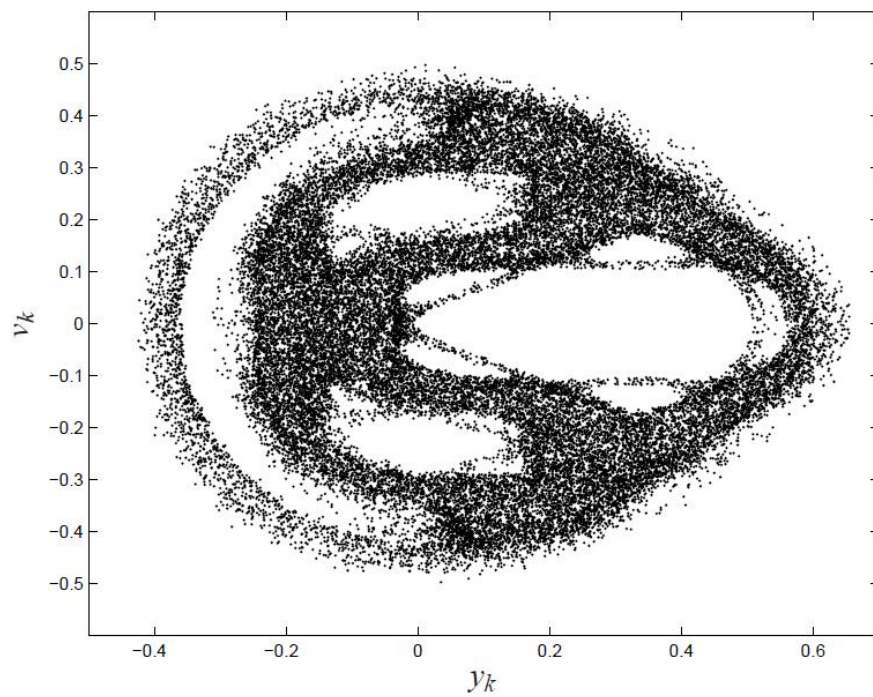
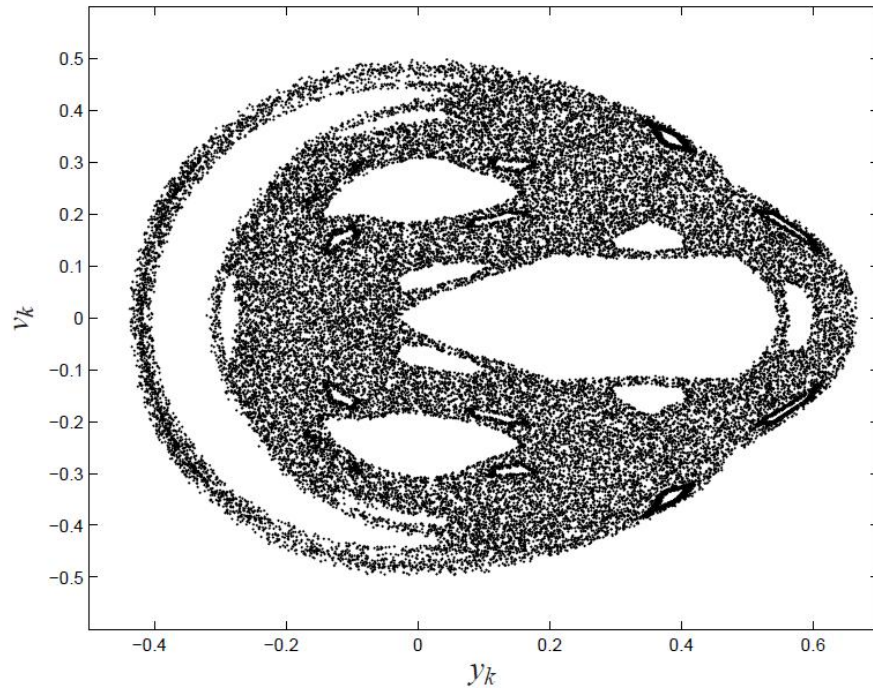


Figura 21: Seção de Poincaré do sistema Hénon-Heiles, definida por $P \equiv \{(y, u, v) \in \mathbb{R}^3 \mid x = 0, \dot{x} > 0\}$, usando o modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$, com condição inicial $(x_0 = 0,000; y_0 = 0,670; u_0 = 0,093; v_0 = 0,000)$, e instante final da simulação $N \approx \frac{120000s}{h}$.

Alguns índices de energia calculados para o modelo de ordem 9 são mostrados na Tabela 7 e nas Figuras 22 e 23. A média da energia calculada na simulação deste modelo com $h = 0,50s$, $\mu_H = 0,12852016$, é bem mais próxima ao valor de energia original do que o modelo de ordem 3 com $h = 0,01s$. À medida que o passo aumenta, apesar da variação total da energia \mathcal{H}_1 dentro de um período de 1s ser da mesma ordem de grandeza quando comparado com os outros métodos, a variação absoluta da energia \mathcal{H}_2 é muito mais baixa. O índice \mathcal{H}_2 somente começa a aumentar a partir do passo dado pela frequência de Nyquist ($h_{max} = 0,67s$), mostrando que não ocorre uma grande variação da energia ao longo das simulações que utilizam um passo menor que este. Isto reafirma que a estrutura do modelo de ordem 9 é melhor para a conservação da energia para valores maiores de h , uma vez que a variação absoluta da energia é bem menor do que os outros modelos quando comparado em um mesmo período.

O índice \mathcal{H}_1 apresenta a mesma ordem de grandeza do que os calculados para os outros modelos. O cálculo deste índice depende do valor final da energia. Logo, se o desvio padrão da energia for alto, este índice pode não ser um bom indicador da conservação da energia, pois o valor final da simulação poderia estar em uma grande faixa de valores. Como o modelo discretizado de ordem 9 possui um menor desvio padrão da energia para valores de h mais elevados, pode-se concluir que este índice é mais preciso para este modelo.

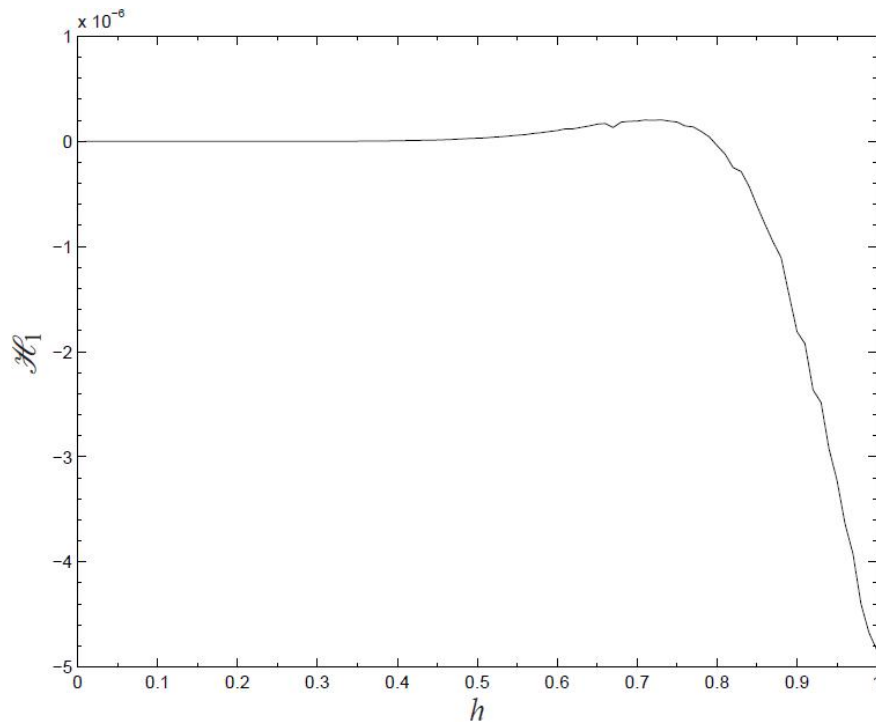


Figura 22: Índice \mathcal{H}_1 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h

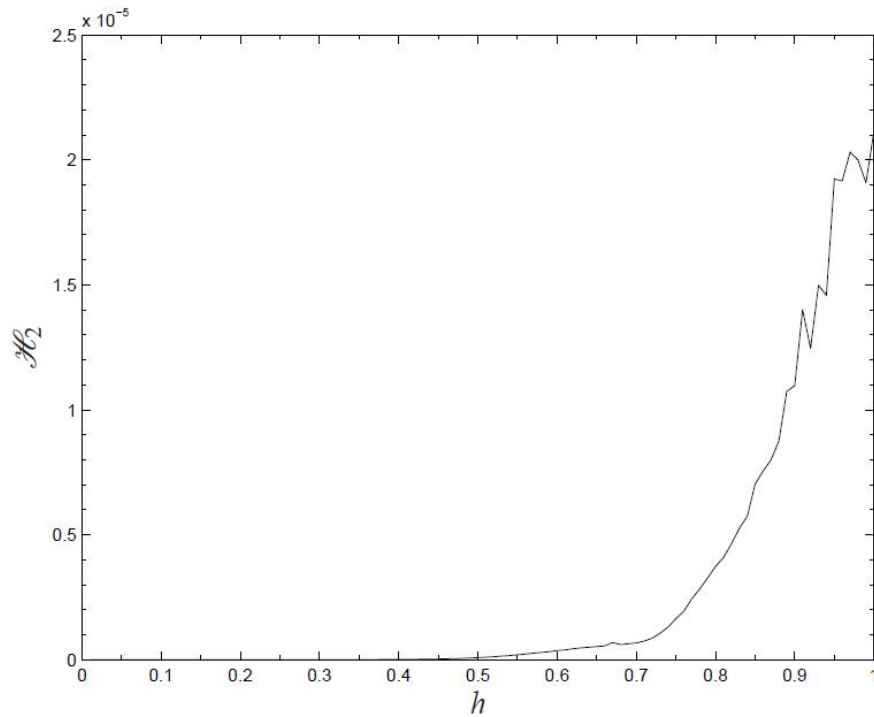


Figura 23: Índice \mathcal{H}_2 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h

Analisando para o caso em que $h = 0,87s$ (Figura 21, item *b*), observa-se que *i*) os pontos estão mais aglomerados em regiões bem definidas, *ii*) não existem mais os detalhes da seção de Poincaré e *iii*) o surgimento do fenômeno de falseamento. Isto pode ser comprovado a partir da análise de frequência da variável x . A Figura 24, item *a*, mostra que para $h = 0,5s$ não existe efeito de borda para frequências próximas de π . Para $h = 0,67s$ (Figura 24, item *b*), nota-se que ocorreram deslocamentos nos picos das frequências. As frequências em cada um dos gráficos devem ser analisadas no contexto de frequências permitidas para um determinado passo de discretização, isto é, $\Omega = \pi$ equivale a $f = \frac{1}{0,50} = 2\text{Hz}$ para $h = 0,50s$, enquanto $\Omega = \pi$ equivale a $f = \frac{1}{0,67} = 1,49\text{Hz}$ para $h = 0,67s$. Dessarte, aparentemente existe uma manutenção das frequências nos mesmos valores absolutos, cuja localização muda na escala relativa. Por exemplo, o pico em $\Omega \approx 0,5$ (ou $f = 0,32\text{Hz}$) no gráfico para $h = 0,50s$ encontra-se em $\Omega \approx 0,67$ (ou $f = 0,32\text{Hz}$) no gráfico para $h = 0,67s$. $h = 0,67s$ é o limite para o passo de discretização. Portanto, para $h > 0,67s$, começa-se a ter sobreposição nas altas frequências.

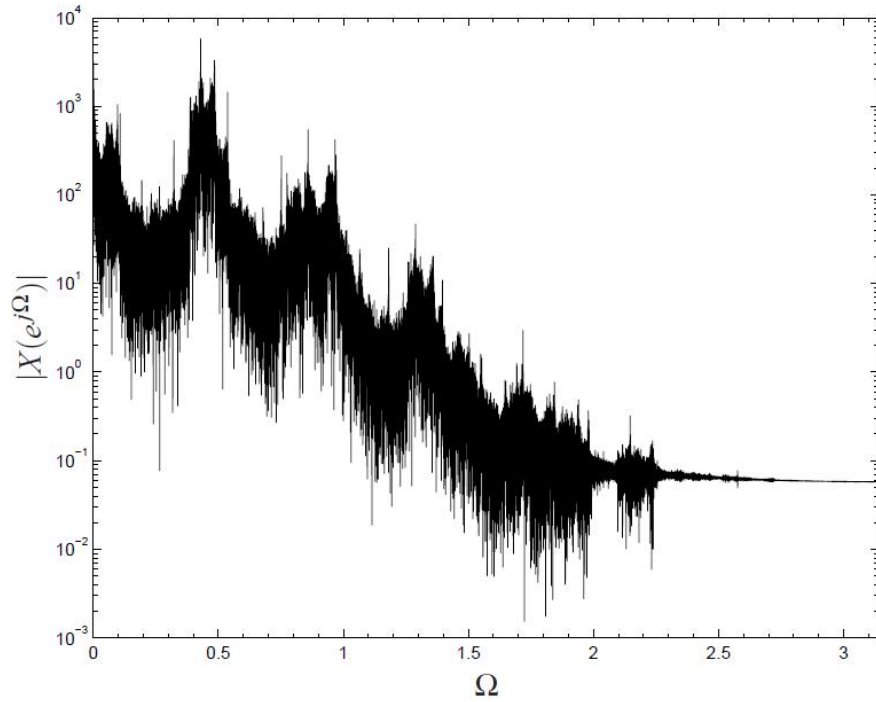
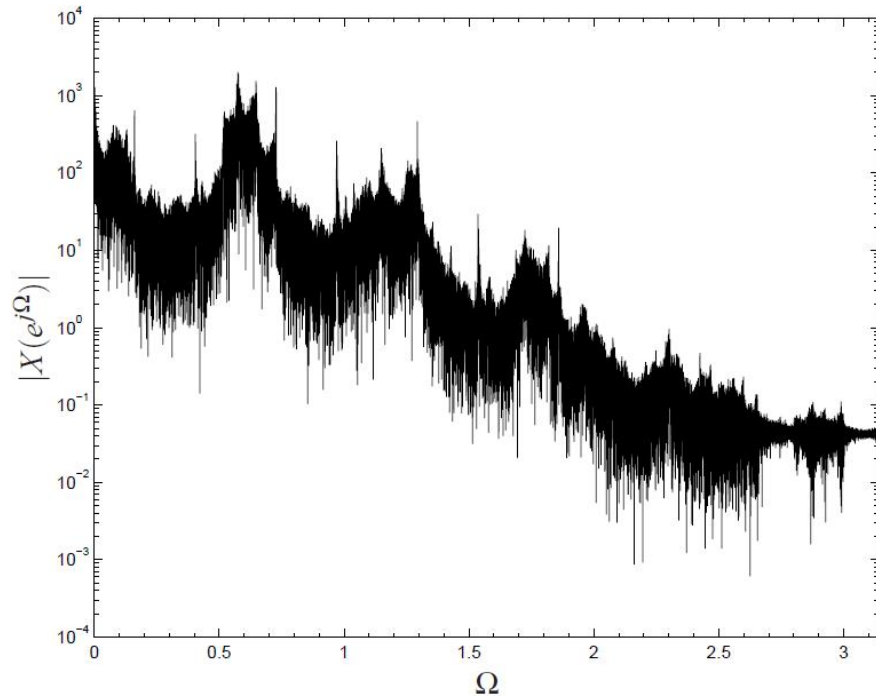
(a) $h = 0,50s$ (b) $h = 0,67s$

Figura 24: Frequências da variável x do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles, com as condição inicial ($x_0 = 0,000$; $y_0 = 0,670$; $u_0 = 0,093$; $v_0 = 0,000$).

Tabela 7: Energia H , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 9 do sistema Hénon-Heiles.

h	H		\mathcal{L}		\mathcal{H}_1	\mathcal{H}_2
	μ_H	σ_H	$\mu_{\mathcal{L}}$	$\sigma_{\mathcal{L}}$		
0,01	0,12852016	$6,3348 \times 10^{-28}$	1,000000	$1,9583 \times 10^{-30}$	$1,448696 \times 10^{-16}$	$1,896626 \times 10^{-14}$
0,02	0,12852016	$4,7411 \times 10^{-28}$	1,000000	$2,0529 \times 10^{-30}$	$3,406656 \times 10^{-16}$	$8,409514 \times 10^{-15}$
0,05	0,12852016	$2,5994 \times 10^{-27}$	1,000000	$2,0231 \times 10^{-30}$	$-3,298697 \times 10^{-16}$	$3,947835 \times 10^{-15}$
0,10	0,12852016	$6,3550 \times 10^{-23}$	1,000000	$1,2390 \times 10^{-26}$	$2,731339 \times 10^{-14}$	$1,889379 \times 10^{-13}$
0,20	0,12852018	$3,4501 \times 10^{-17}$	1,000000	$1,3462 \times 10^{-20}$	$1,016841 \times 10^{-11}$	$5,206593 \times 10^{-11}$
0,30	0,12852096	$1,5283 \times 10^{-13}$	1,000000	$4,4313 \times 10^{-17}$	$4,489597 \times 10^{-10}$	$1,205744 \times 10^{-9}$
0,40	0,12853179	$3,3276 \times 10^{-11}$	1,000000	$1,3997 \times 10^{-14}$	$5,051809 \times 10^{-9}$	$1,035140 \times 10^{-8}$
0,50	0,12860021	$1,9327 \times 10^{-9}$	1,000000	$1,2579 \times 10^{-12}$	$2,951455 \times 10^{-8}$	$8,322686 \times 10^{-8}$
0,60	0,12884693	$3,1750 \times 10^{-8}$	1,000000	$4,8064 \times 10^{-11}$	$1,023516 \times 10^{-7}$	$3,715236 \times 10^{-7}$
0,67	0,12895637	$5,9446 \times 10^{-8}$	1,000000	$4,1980 \times 10^{-10}$	$1,316455 \times 10^{-7}$	$6,911072 \times 10^{-7}$
0,70	0,12922939	$1,5124 \times 10^{-7}$	1,000000	$1,0432 \times 10^{-9}$	$1,932136 \times 10^{-7}$	$6,742528 \times 10^{-7}$
0,80	0,12840850	$9,0081 \times 10^{-9}$	1,000000	$1,4362 \times 10^{-8}$	$-3,978995 \times 10^{-8}$	$3,732191 \times 10^{-6}$
0,87	0,12387589	$5,4749 \times 10^{-6}$	9,999966	$7,0742 \times 10^{-8}$	$-9,557870 \times 10^{-7}$	$7,988563 \times 10^{-6}$

Os expoentes de Lyapunov para as simulações do modelo discretizado de ordem 9 encontram-se na Tabela 8. A simetria dos expoentes não se mantém à medida que o passo de discretização aumenta, comportamento semelhante a dos outros modelos discretizados. Porém, os valores de \mathcal{L} para este modelo são levemente melhores do que os do modelo discretizado por Monaco e Normand-Cyrot de ordem 3. Note que, para $h = 0,05s$ e $h = 0,10s$, os valores de \mathcal{L} do modelo de ordem 9 são um pouco menores que o de ordem 3, mas da mesma ordem de grandeza. A matriz jacobiana do modelo de ordem 9 contém todos os termos da matriz jacobiana do modelo de ordem 3 e os termos referentes as ordens 4 a 9. Portanto, para valores pequenos de h , a matriz jacobiana do modelo de ordem 9 se assemelha a matriz jacobiana do modelo de ordem 3, pois os termos de ordem mais elevada não são tão representativos, pois são multiplicados por h^η . O somatório dos expoentes de Lyapunov não se mantém à medida que h aumenta, distanciando-se do zero a partir de $h > 0,5s$, mas é bem menor que o do modelo de ordem 3. A dimensão se mantém constante e igual a 4 para qualquer valor de h abaixo do passo dado pela frequência de Nyquist. O somatório dos expoentes de Lyapunov e a dimensão de Kaplan-Yorke em função do passo de discretização estão mostrados nas Figura 25 e 26, respectivamente.

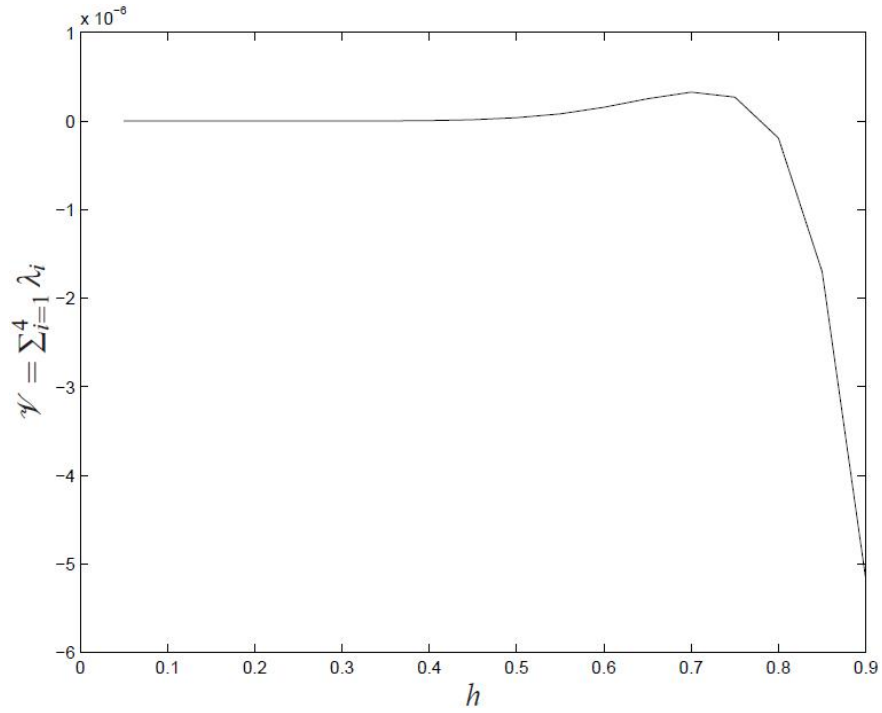


Figura 25: Somatório dos expoentes de Lyapunov para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h .

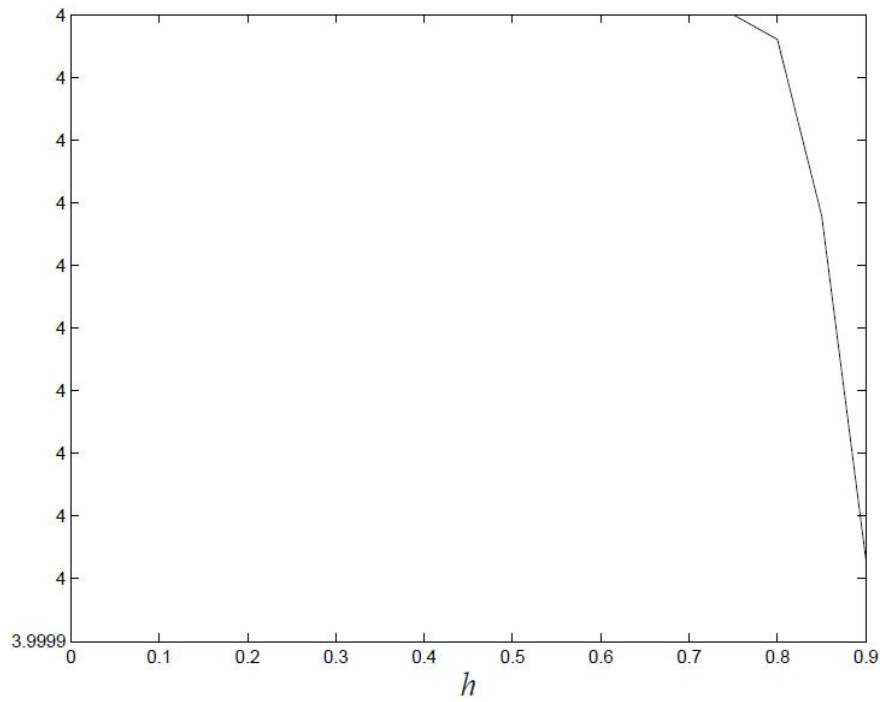


Figura 26: Dimensão de Kaplan-Yorke para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 9$ do sistema Hénon-Heiles em função do passo h .

Tabela 8: Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 9 do sistema Hénon-Heiles.

$h(s)$	$\lambda_1, \lambda_4, \lambda_2, \lambda_3$	$\mathcal{S} = \frac{\max(\lambda_i , \lambda_{5-i})}{\min(\lambda_i , \lambda_{5-i})}$	$\mathcal{V} = \sum_{i=1}^4 \lambda_i$	D_{KY}	
0,0500	-0,0013494692	1,0000539311	$-4,82469967 \times 10^{-18}$	4,0000000000	
	0,0013495419				
	-0,0004859516	1,0001497872			
	0,0004858788				
0,1000	-0,0053136794	1,0002046225			
	0,0053147667	1,0005630520			
	-0,0019321669				
	0,0019310796				
0,1500	-0,0116659209	1,0004511887	$3,97469384 \times 10^{-13}$	4,0000000000	
	0,0116711844				
	-0,0042837182	1,0012302411			
	0,0042784547				
0,2000	-0,0201325441	1,0007774747	$6,83338715 \times 10^{-12}$		4,0000000000
	0,0201481966				
	-0,0074538002	1,0021043595			
	0,0074381477				
0,3000	-0,0287315792	1,0243854101	$3,59331152 \times 10^{-10}$	4,0000000000	
	0,0294322106				
	-0,0218036448	1,0332005177			
	0,0211030138				
0,5000	-0,0613950800	1,0734534595	$3,76501571 \times 10^{-8}$		4,0000000000
	0,0659047610				
	-0,0567872694	1,0862633541			
	0,0522776261				
0,7000	-0,0864913450	1,1222949994	$3,27464524 \times 10^{-7}$	4,0000000000	
	0,0970688040				
	-0,0856875881	1,1408210254			
	0,0751104566				

4.1.9 Comparação entre os métodos e comentários adicionais

A Tabela 9 compara a média da energia para cada método de discretização apresentado para alguns valores de h . Também é mostrado o quão distante a energia está com relação a energia do sistema contínuo original por meio da relação $\frac{\mu_H}{H_0}$, sendo H_0 a energia do sistema contínuo original dada pela eq. (4.2). Para $h = 0,02s$, Mickens, MNC com escolha de termos e MNC com $\eta = 9$ apresentam aproximadamente a mesma energia, igual a 99.98% da energia original. Com o aumento de h , Mickens e MNC com escolha de termos degradam significativamente. Para valores elevados de h , $h = 0,67s$, apenas MNC com $\eta = 9$ consegue se manter próximo da energia original, diferindo apenas 0,32%.

Tabela 9: Média da energia μ_H e percentual $\frac{\mu_H}{H_0}$, sendo H_0 a energia do sistema contínuo original dada pela eq. (4.2), do sistema Hénon-Heiles para os métodos de discretização proposto por Mickens e por Monaco e Normand-Cyrot de ordem 3, com escolha de termos, e de ordem 9.

$h(s)$	Mickens		MNC, $\eta = 3$		MNC, c/ escolha		MNC, $\eta = 9$	
	μ_H	μ_H/H_0	μ_H	μ_H/H_0	μ_H	μ_H/H_0	μ_H	μ_H/H_0
0,02	0,12852654	99,98%	0,12810173	99,65%	0,12852016	99,98%	0,12852016	99,98%
0,30	0,12997370	101,11%	–	–	0,12831026	99,82%	0,12852096	99,98%
0,50	0,13268993	103,22%	–	–	0,12062185	93,83%	0,12860021	100,04%
0,67	0,13651391	106,20%	–	–	0,09856538	76,68%	0,12895637	100,32%

A Tabela 10 compara a média do produto dos autovalores da matriz jacobiana para cada método de discretização apresentado para alguns valores de h . O modelo de Mickens gerou um falso indicador sobre a conservação da energia, pois a energia cresce à medida que h aumenta, mas o produto dos autovalores é igual a 1 para qualquer valor de h . Tal fato deve-se à matriz jacobiana deste modelo possuir determinante igual a 1. O modelo MNC com $\eta = 3$ consegue indicar corretamente a conservação da energia, sendo aproximadamente constante para $h = 0,02s$ e decaindo a partir deste passo. Ocorre uma melhora no modelo MNC com escolha de termos em relação ao de ordem 3, pois o produto ficou mais próximo de 1 para valores mais elevados de h . O modelo MNC com $\eta = 9$ apresentou o melhor resultado, pois manteve o produto dos autovalores igual a 1 até para $h = 0,67s$.

Tabela 10: Média do produto dos autovalores da matriz jacobiana $\mu_{\mathcal{J}}$ do sistema Hénon-Heiles para os métodos de discretização proposto por Mickens e por Monaco e Normand-Cyrot de ordem 3, com escolha de termos, e de ordem 9.

$h(s)$	Mickens	MNC, $\eta = 3$	MNC, c/ escolha	MNC, $\eta = 9$
0,02	1,000000	1,000000	0,999999	1,000000
0,30	1,000000	–	0,997942	1,000000
0,50	1,000000	–	0,986659	1,000000
0,67	1,000000	–	0,965865	1,000000

O cálculo do índice \mathcal{H}_1 leva em consideração o valor final de energia da simulação. Pela análise dos gráficos das energias e tabelas de todos os modelos, apresentados nas seções anteriores, percebe-se que o desvio padrão da energia aumenta à medida que o passo aumenta. Logo, aumenta a variação da energia ao longo das simulações para os passos mais elevados. Assim, o índice \mathcal{H}_1 pode não ser um bom indicador da conservação da energia, pois, dependendo do valor final da simulação, pode dar um resultado completamente diferente.

A Tabela 11 compara o índice \mathcal{H}_2 para cada método de discretização apresentado para alguns valores de h . O modelo MNC com $\eta = 9$ apresentou o melhor resultado para todos os passos de discretização.

Tabela 11: Índice $\mu_{\mathcal{H}_2}$ do sistema Hénon-Heiles para os métodos de discretização proposto por Mickens e por Monaco e Normand-Cyrot de ordem 3, com escolha de termos, e de ordem 9.

$h(s)$	Mickens	MNC, $\eta = 3$	MNC, c/ escolha	MNC, $\eta = 9$
0,02	$1,309897 \times 10^{-3}$	$1,090057 \times 10^{-7}$	$4,931968 \times 10^{-15}$	$8,409514 \times 10^{-15}$
0,30	$1,962283 \times 10^{-2}$	—	$1,446542 \times 10^{-7}$	$1,205744 \times 10^{-9}$
0,50	$3,213178 \times 10^{-2}$	—	$3,153563 \times 10^{-6}$	$8,322686 \times 10^{-8}$
0,67	$4,276189 \times 10^{-2}$	—	$1,376200 \times 10^{-5}$	$6,911072 \times 10^{-7}$

A Tabela 12 compara o índice de simetria \mathcal{S} e o somatório \mathcal{V} dos expoentes de Lyapunov para os métodos apresentados. O modelo discretizado por Mickens apresenta os melhores resultados de simetria para $h \leq 0,30s$. Porém, para $h > 0,3s$, quando este modelo começa a demonstrar mais a distorção causada pela quebra de simetria temporal e começa a se comportar como não-conservativo, a simetria dos índices é quebrada rapidamente a medida que h aumenta. O somatório dos expoentes de Lyapunov calculado para o modelo Mickens é igual a 0 para qualquer valor de h pelas mesmas razões da falsa indicação apontada pelo produto dos autovalores. O somatório dos expoentes de Lyapunov para os modelos discretizados por Monaco e Normand-Cyrot acompanham o comportamento da energia e do produto dos autovalores da matriz jacobiana, mostrando que podem corretamente ser usados como um indicador. Existe uma melhora nos índices \mathcal{S} e \mathcal{V} do modelo MNC de ordem mais elevada.

Tabela 12: Índice de simetria \mathcal{S} e somatório \mathcal{V} dos expoentes de Lyapunov do sistema Hénon-Heiles para os métodos de discretização proposto por Mickens e por Monaco e Normand-Cyrot de ordem 3 e de ordem 9.

$h(s)$	Mickens		MNC, $\eta = 3$		MNC, $\eta = 9$	
	\mathcal{S}	\mathcal{V}	\mathcal{S}	\mathcal{V}	\mathcal{S}	\mathcal{V}
0,05	1,0000000054	$-6,24500451 \times 10^{-17}$	1,0004838015	$-1,75869548 \times 10^{-6}$	1,0000539311	$-4,82469967 \times 10^{-18}$
	1,0000000055		1,0019188487		1,0001497872	
0,10	1,0000003651	$-5,50774704 \times 10^{-17}$	1,0002190448	$-2,64676411 \times 10^{-5}$	1,0002046225	$7,18804356 \times 10^{-15}$
	1,0000003859		1,0093821018		1,0005630520	
0,30	1,0055205697	$-4,51028104 \times 10^{-17}$	—	—	1,0243854101	$3,59331152 \times 10^{-10}$
	1,0056755878		—		1,0332005177	
0,50	1,1984607737	$1,82145965 \times 10^{-17}$	—	—	1,0734534595	$3,76501571 \times 10^{-8}$
	1,2860524467		—		1,0862633541	

O modelo discretizado por Mickens obteve valores bem mais elevados de energia, do produto dos autovalores da matriz jacobiana e do índice \mathcal{H}_2 quando comparado com o

modelo MNC com escolha de termos. Isto deve-se ao fato que o modelo discretizado por Mickens não mantém a simetria e, conseqüentemente, não consegue manter a energia em patamares mais baixos. Porém, ele apresenta-se como um modelo bem robusto, pois conseguiu atingir o passo dado pela frequência de Nyquist. Neste contexto, produziu-se um modelo híbrido, o modelo discretizado com o método de Mickens e com os termos de ordem elevada (7 a 9) do métodos de Monaco e Normand-Cyrot. Seções de Poincaré resultantes da simulação deste modelos são mostradas na Figura 27. A quebra da simetria ainda continua presente, pelo mesmo problema apresentado na seção 4.1.5, como pode ser percebida uma leve distorção na seção de Poincaré para $h = 0,20s$. Para $h = 0,50s$, o modelo não consegue gerar uma solução válida. Portanto, o modelo resultante pela aplicação do método MNC necessita de todos os termos da expansão para uma melhor aproximação do sistema contínuo.

O modelo MNC de ordem elevada consegue conservar mais a energia do que o de baixa ordem. Como o método proposto por Monaco e Normand-Cyrot corresponde a uma aproximação do fluxo que dá a solução do sistema, aumentar a ordem η da eq. (2.67) corresponde a acrescentar termos de forma a melhorar a aproximação do fluxo real. Conseqüentemente, melhorando-se a aproximação consegue-se deixar o comportamento do modelo mais próximo do sistema contínuo e conservar a energia. Tal constatação também pode ser analisada sob o aspecto da simplecticidade usando o critério dado pela eq. (2.19). Para os modelos MNC de ordens 3 e 9 do sistema Hénon-Heiles, tem-se:

$$\mathcal{W}^{\eta=3} = \left(J_k^{MNC, \eta=3} \right)^T W J_k^{MNC, \eta=3} = W + \tilde{W}^{\eta=3} \quad (4.9)$$

$$\mathcal{W}^{\eta=9} = \left(J_k^{MNC, \eta=9} \right)^T W J_k^{MNC, \eta=9} = W + \tilde{W}^{\eta=9} \quad (4.10)$$

onde $J_k^{MNC, \eta=3}$ e $J_k^{MNC, \eta=9}$ são as matrizes jacobianas dos modelos MNC de ordens 3 e 9, respectivamente, W é a matriz da eq. (2.17), $\tilde{W}^{\eta=3}$ e $\tilde{W}^{\eta=9}$ são matrizes anti-simétricas dadas por:

$$W = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

$$\tilde{M}^{\eta=3} = \begin{bmatrix} 0 & w_{1,2}^{\eta=3} & w_{1,3}^{\eta=3} & w_{1,4}^{\eta=3} \\ -w_{1,2}^{\eta=3} & 0 & w_{2,3}^{\eta=3} & w_{2,4}^{\eta=3} \\ -w_{1,3}^{\eta=3} & -w_{2,3}^{\eta=3} & 0 & w_{3,4}^{\eta=3} \\ -w_{1,4}^{\eta=3} & -w_{2,4}^{\eta=3} & -w_{3,4}^{\eta=3} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

$$\tilde{M}^{\eta=9} = \begin{bmatrix} 0 & w_{1,2}^{\eta=9} & w_{1,3}^{\eta=9} & w_{1,4}^{\eta=9} \\ -w_{1,2}^{\eta=9} & 0 & w_{2,3}^{\eta=9} & w_{2,4}^{\eta=9} \\ -w_{1,3}^{\eta=9} & -w_{2,3}^{\eta=9} & 0 & w_{3,4}^{\eta=9} \\ -w_{1,4}^{\eta=9} & -w_{2,4}^{\eta=9} & -w_{3,4}^{\eta=9} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

sendo $w_{i,j}^{\eta=3}$ um polinômio de h com termos de h^4 a h^6 e $w_{i,j}^{\eta=9}$ um polinômio de h com termos de h^{10} a h^{18} , ou seja, $w_{i,j}^{\eta=3} = a_4 h^4 + \dots + a_6 h^6$ e $w_{i,j}^{\eta=9} = a_{10} h^{10} + \dots + a_{18} h^{18}$. Se $h < 1$, $w_{i,j}^{\eta=9}$ é mais próximo de 0 do que $w_{i,j}^{\eta=3}$ para um mesmo valor de h , e, conseqüentemente, $\mathscr{W}^{\eta=9}$ é mais próximo de W do que $\mathscr{W}^{\eta=3}$. Logo, o modelo MNC de ordem 9 consegue manter mais a energia, pois consegue chegar mais próximo ao atendimento do critério da simpleticidade. À medida que $\eta \rightarrow \infty$, $\mathscr{W}^{\eta} \rightarrow W$, deixando o método mais simplético.

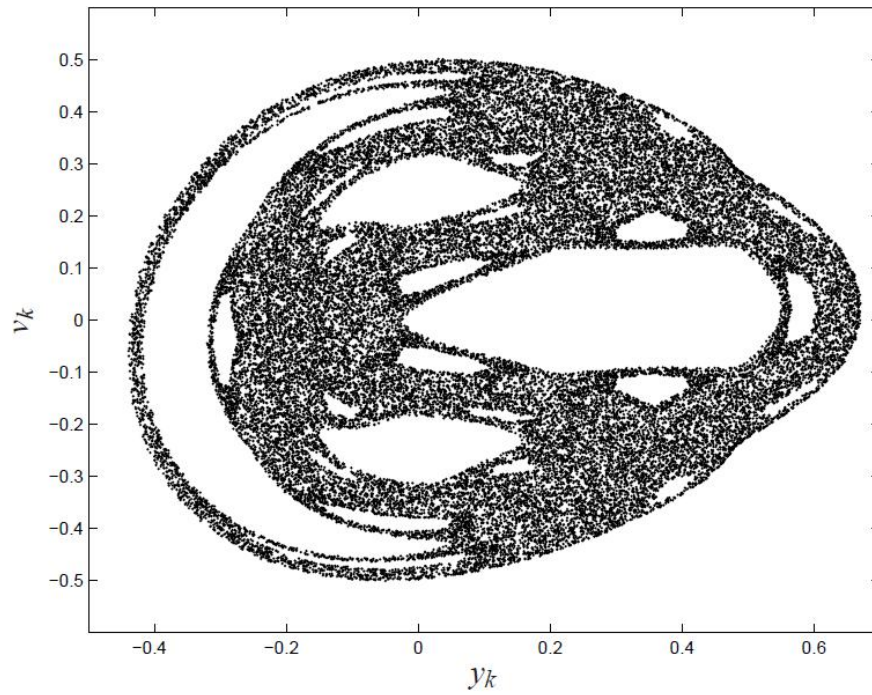
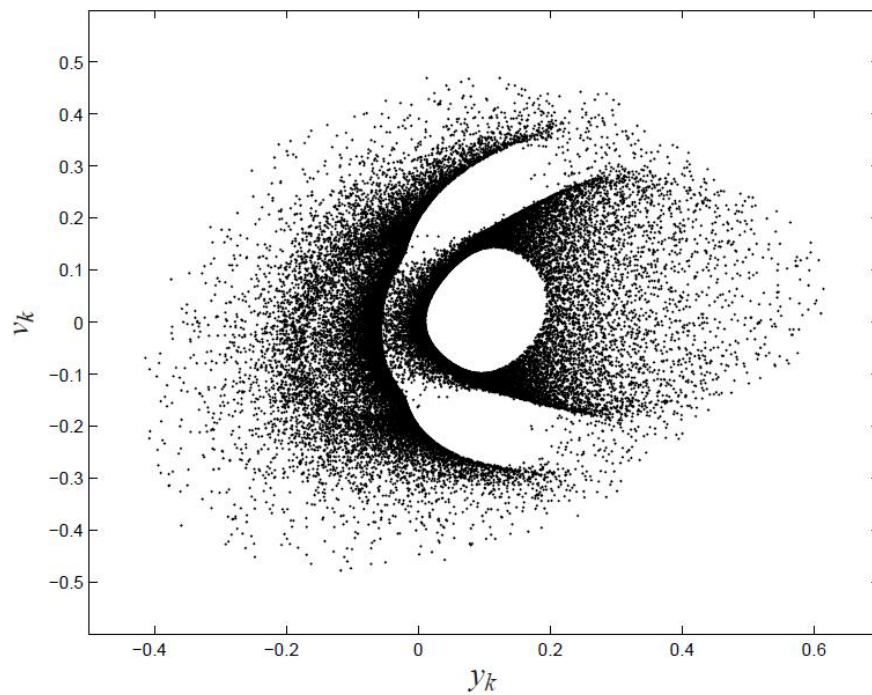
(a) $h = 0,20s$ (b) $h = 0,50s$

Figura 27: Seção de Poincaré do sistema Hénon-Heiles, definida por $P \equiv \{(y, u, v) \in \mathbb{R}^3 \mid x = 0, \dot{x} > 0\}$, usando o modelo discretizado pelo método híbrido, Mickens e termos de 7 a 9 de Monaco e Normand-Cyrot, com condição inicial $(x_0 = 0,000; y_0 = 0,670; u_0 = 0,093; v_0 = 0,000)$, e instante final da simulação $N \approx \frac{120000s}{h}$.

4.2 Sistema Sprott-Nosé-Hoover

4.2.1 Definição do nível de energia e da condição inicial

A condição inicial escolhida foi a mesma utilizada em (SPROTT, 2010) para o sistema reduzido, fazendo-se as adaptações necessárias para o cálculo da variável s :

$$(x_0, y_0, z_0, s_0) = (0, 0; 0, 1; 0, 0; e^{-0,005}) \quad (4.14)$$

a qual resulta na energia:

$$H_0 = 0,000 \quad (4.15)$$

Como a energia inicial é igual a zero, a fim que se possa analisar perdas absolutas da energia, será analisada a média de grupo de termos, como mostra a eq. (3.18). Para o sistema Sprott-Nosé-Hoover, considerar-se-á:

$$H_1 = s \left(\frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} + \frac{z^2}{2} \right) \quad (4.16)$$

$$H_2 = s \ln(s) \quad (4.17)$$

A solução da simulação do sistema Sprott-Nosé-Hoover, eq. (2.44), é equivalente à solução do sistema termostático Nosé-Hoover, eq. (2.41), com a seguinte condição inicial:

$$(q_0, p_0, p_{s,0}, s_0) = (x_0, y_0 s_0, -z_0, s_0) = (0, 0; 0, 1 \times e^{-0,005}; 0, 0; e^{-0,005}) \quad (4.18)$$

e valor para energia H_0 igual ao definido pela eq. (4.15).

4.2.2 Seção de Poincaré característica do sistema contínuo

A seção de Poincaré, eq. (2.46), gerada a partir da simulação com a condição inicial dada pela eq. (4.14) é mostrada na Figura 28. A simetria presente em sistemas conservativos pode ser observada tanto em $y_n = 0$ quanto em $z_n = 0$.

4.2.3 Análise da frequência do sistema contínuo

O espectro de Fourier da variável y do sistema Sprott-Nosé-Hoover, eq. (2.44), é mostrado na Figura 29, na qual nota-se que a frequência máxima é $f_{max} \approx 5,5$ Hz. Logo,

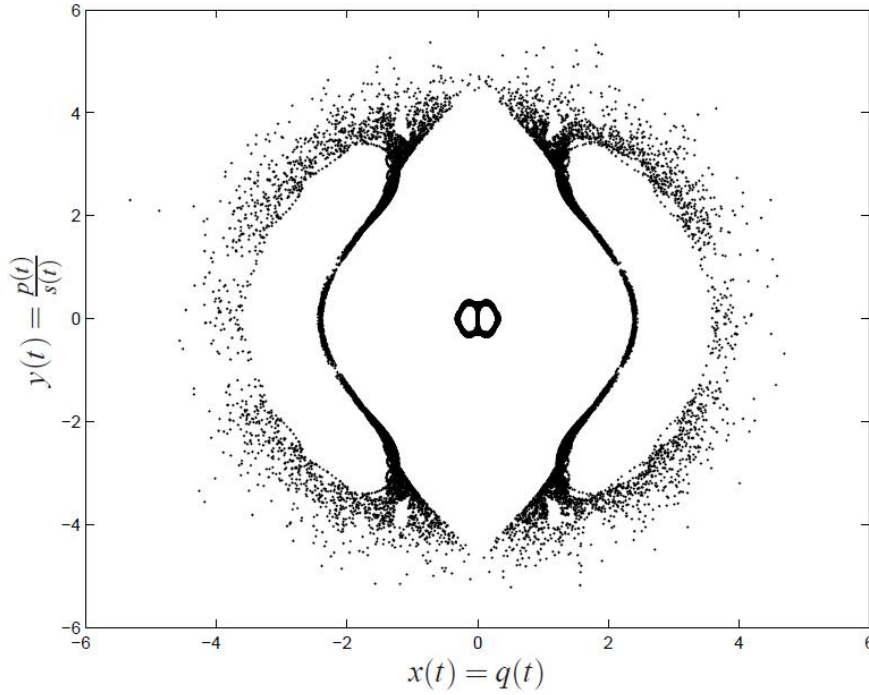


Figura 28: Seção de Poincaré do sistema Sprott-Nosé-Hoover contínuo, definida por $P \equiv \{(x, y, s) \in \mathbb{R}^3 \mid z = 0, \dot{z} > 0\}$, com a condição inicial $(x_0 = 0,00; y_0 = 0,10; z_0 = 0,00; s_0 = e^{-0,005})$. Simulação realizada utilizando o método de integração simplético Runge-Kutta com coeficientes Gauss-Legendre de ordem 6 e passo de integração $h = 0,001$ (HAIRER; LUBICH; WANNER, 2006).

a frequência de Nyquist é igual a $f_{Nyquist} = 11,0$ Hz. Para se obter modelos discretizados válidos, topologicamente equivalentes ao sistema original, deve-se ter o passo da discretização menor do que $h_{max} = 0,09$ s.

4.2.4 Expoentes de Lyapunov e Dimensão de Kaplan-Yorke

Os expoentes de Lyapunov do sistema contínuo Sprott-Nosé-Hoover, calculados conforme a seção 3.2.4, são:

$$\begin{cases} \lambda_1 = -0,0480991680348109 \\ \lambda_2 = -0,0001190502822942 \\ \lambda_3 = 0,0093247141168384 \\ \lambda_4 = 0,0388935042002636 \end{cases} \quad (4.19)$$

A dimensão de Kaplan-Yorke, dada pela eq. (2.16), é:

$$D_{KY} = 3,9999999999999347 \quad (4.20)$$

Como $\mathcal{V} = \sum_{i=1}^4 \lambda_i = -3,140106 \times 10^{-15} \approx 0,00$, o sistema é conservativo. Porém, não existe simetria nos expoentes de Lyapunov, pois o sistema Sprott-Nosé-Hoover não é um

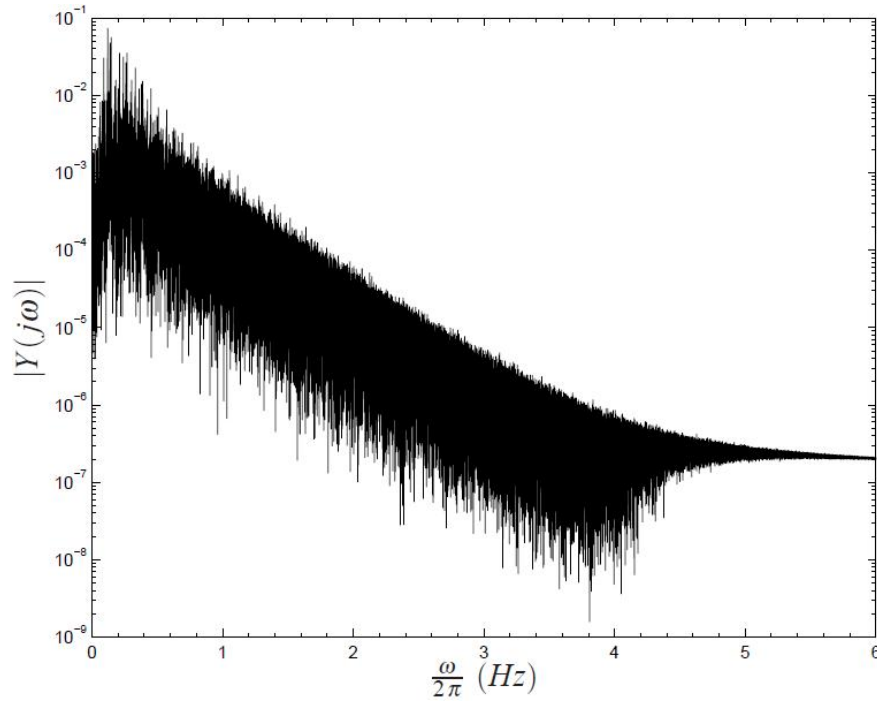


Figura 29: Frequências da variável y do sistema Sprott-Nosé-Hoover contínuo, com as condições iniciais $(x_0 = 0,00; y_0 = 0,10; z_0 = 0,00; s_0 = e^{-0,005})$.

sistema Hamiltoniano e não se aplica a propriedade dada pela eq. (2.3) (seção 2.1.2).

Os expoentes de Lyapunov calculados para o sistema termostático Nosé-Hoover, eq. (2.41), são:

$$\begin{cases} \lambda_1 = -0,0170445700730162 \\ \lambda_2 = -0,0001399840718515 \\ \lambda_3 = 0,0001296814206158 \\ \lambda_4 = 0,0170548727238845 \end{cases} \quad (4.21)$$

e a dimensão de Kaplan-Yorke é:

$$D_{KY} = 3,999999999784492 \quad (4.22)$$

O sistema Nosé-Hoover, que originou o sistema Sprott-Nosé-Hoover, exibe simetria nos expoentes de Lyapunov, pois ele é um sistema conservativo hamiltoniano. A soma dos expoentes de Lyapunov é igual a $-3,673242 \times 10^{-13} \approx 0,00$, mostrando que o sistema também é conservativo. A dimensão D_{KY} , que deveria ser igual a 4, não é exatamente igual a este valor em função de precisão numérica computacional.

4.2.5 Modelo discretizado pelo método de Mickens

Utilizando-se os passos descritos na seção 2.5.2 para a discretização pelo método de Mickens, conseguiu-se chegar em alguns modelos válidos. Um destes é:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{y_{k+1}-y_k}{\phi} = y_{k+1} z_k - x_k \\ \frac{x_{k+1}-x_k}{\phi} = y_{k+1} \\ \frac{z_{k+1}-z_k}{\phi} = 1 - y_k y_{k+1} \\ \frac{s_{k+1}-s_k}{\phi} = -(2s_k - s_{k+1}) z_{k+1} \end{array} \right. \xrightarrow{\phi=h} \left\{ \begin{array}{l} y_{k+1} = \frac{y_k - h x_k}{1 - h z_k} \\ x_{k+1} = x_k + h y_{k+1} \\ z_{k+1} = z_k + h (1 - y_k y_{k+1}) \\ s_{k+1} = \frac{s_k (1 - 2h z_{k+1})}{1 - h z_{k+1}} \end{array} \right. \quad (4.23)$$

onde o valor utilizado para ϕ foi de $\phi = h$, dado pela eq. (2.54), atentando-se ao fato de ϕ não ultrapassar o limite máximo do passo da discretização dado pelo critério de Nyquist.

Os índices de energia calculados na simulação do modelo acima com condição inicial dada pela eq. (2.45), $h = 0,01s$ e $N = 6,0 \times 10^6$, estão mostrados na Tabela 13. A média da energia μ_H é próxima de zero, semelhante ao valor do sistema original, e o desvio padrão σ_H é baixo. O índice \mathcal{H}_1 mostra que a variação total da energia em um período de simulação é praticamente insignificante. A variação absoluta da energia, no mesmo período, não é desprezível, flagrada pelo índice \mathcal{H}_2 .

Apesar do modelo apresentar bons índices para a preservação da energia, eles não são suficientes para determinar se o modelo é ideal. Considere, por exemplo, a seção de Poincaré gerada pela simulação na condição anterior, a qual está mostrada na Figura 30 (item *a*). A solução claramente não é equivalente à do sistema contínuo original, pois a simulação do modelo discreto não visitou todo o espaço visitado pelo solução do sistema contínuo original.

Aumentando-se o passo da discretização para $h = 0,05s$, a simetria é perdida, como pode ser percebido pela Figura 30 (item *b*). Tal fato deve-se a quebra da invariância do tempo no modelo discretizado.

Tabela 13: Energia H , energia para um grupos de termos H_1 , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} , e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Mickens do sistema Sprott-Nosé-Hoover.

$h(s)$	μ_H	σ_H	\mathcal{H}_1	\mathcal{H}_2
0,01	$-1,70534 \times 10^{-3}$	$1,66752 \times 10^{-2}$	$-1,26017 \times 10^{-22}$	$1,26079 \times 10^{-3}$
0,05	$7,84069 \times 10^1$	1,264246	$2,240767 \times 10^{-6}$	1,237643

Os expoentes de Lyapunov estão na Tabela 14. Para $h = 0,01s$, não se consegue obter uma solução válida, o que se reflete nos índices \mathcal{S} e \mathcal{V} . Os expoentes são da ordem de

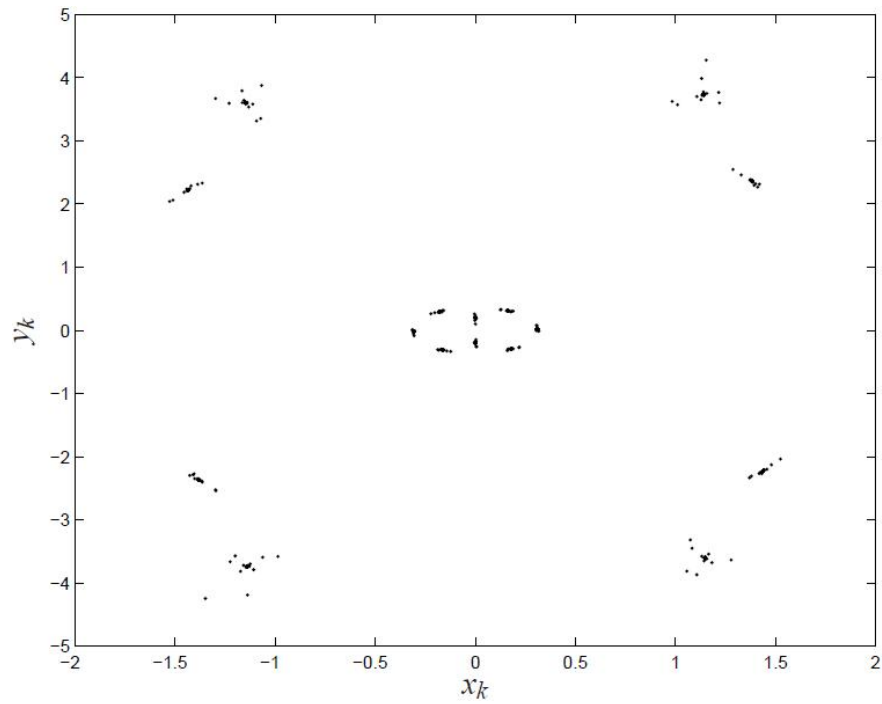
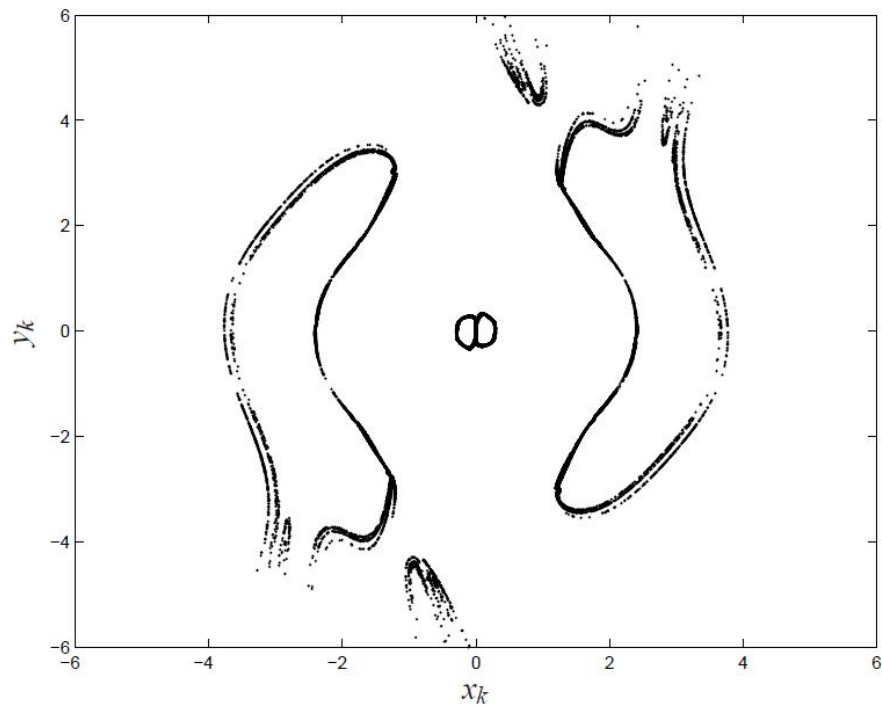
(a) $h = 0,01s$ (b) $h = 0,05s$

Figura 30: Seção de Poincaré do sistema Sprott-Nosé-Hoover, definida por $P \equiv \{(x, y, s) \in \mathbb{R}^3 \mid z = 0, \dot{z} > 0\}$, usando o modelo discretizado pelo método proposto por Mickens, eq. (4.23), com condição inicial $(x_0 = 0,00; y_0 = 0,10; z_0 = 0,00; s_0 = e^{-0,005})$ e instante final da simulação $N \approx \frac{120000s}{h}$.

grandeza $\sim 10^{-5}$, e o somatório dos expoentes é da ordem de grandeza $\sim 10^{-4}$; logo, não

se pode afirmar que a energia foi conservada. E a dimensão de Kaplan-Yorke é diferente de $n = 4$. Para o valor mais elevado de h , os resultados ficam ainda piores.

Tabela 14: Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Mickens do sistema Sprott-Nosé-Hoover.

$h(s)$	$\lambda_1, \lambda_4, \lambda_2, \lambda_3$	$\mathcal{V} = \sum_{i=1}^4 \lambda_i$	D_{KY}
0,0100	-0,0000919477	$-1,22670114 \times 10^{-4}$	2,3853229211
	0,0000543549		
	-0,0000499814		
	-0,0000350959		
0,0500	-0,0023895624	$-3,70787799 \times 10^{-3}$	2,2819184021
	0,0017551528		
	-0,0018358855		
	-0,0012375829		

Aplicando-se outra ordem para a discretização das variáveis e outras substituições no método proposto por Mickens, pode-se chegar em diversos outros modelos. Alguns deles são:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{y_{k+1}-y_k}{\phi} = y_{k+1} z_k - x_k \\ \frac{x_{k+1}-x_k}{\phi} = y_{k+1} \\ \frac{z_{k+1}-z_k}{\phi} = 1 - y_k y_{k+1} \\ \frac{s_{k+1}-s_k}{\phi} = -(2s_k - s_{k+1}) z_{k+1} \end{array} \right. \xrightarrow{\phi=h} \left\{ \begin{array}{l} y_{k+1} = \frac{y_k - h x_k}{1 - h z_k} \\ x_{k+1} = x_k + h \left(\frac{y_k + y_{k+1}}{2} \right) \\ z_{k+1} = z_k + h \left(1 - \frac{y_{k+1}^2 + y_k y_{k+1} + y_k^2}{3} \right) \\ s_{k+1} = \frac{s_k (1 - 2h z_{k+1})}{1 - h z_{k+1}} \end{array} \right. \quad (4.24)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{x_{k+1}-x_k}{\phi} = y_k \\ \frac{y_{k+1}-y_k}{\phi} = y_{k+1} z_k - x_{k+1} \\ \frac{z_{k+1}-z_k}{\phi} = 1 - y_k y_{k+1} \\ \frac{s_{k+1}-s_k}{\phi} = -(2s_k - s_{k+1}) z_{k+1} \end{array} \right. \xrightarrow{\phi=h} \left\{ \begin{array}{l} x_{k+1} = x_k + h [y_k] \\ y_{k+1} = \frac{y_k - h x_{k+1}}{1 - \phi z_k} \\ z_{k+1} = z_k + h \left[1 - \frac{y_{k+1}^2 + y_k y_{k+1} + y_k^2}{3} \right] \\ s_{k+1} = \frac{s_k (1 - 2h z_{k+1})}{1 - h z_{k+1}} \end{array} \right. \quad (4.25)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{z_{k+1}-z_k}{\phi} = 1 - y_k^2 \\ \frac{y_{k+1}-y_k}{\phi} = y_{k+1} z_{k+1} - x_k \\ \frac{x_{k+1}-x_k}{\phi} = y_{k+1} \\ \frac{s_{k+1}-s_k}{\phi} = -(2s_k - s_{k+1}) z_{k+1} \end{array} \right. \xrightarrow{\phi=h} \left\{ \begin{array}{l} z_{k+1} = z_k + \phi [1 - y_k^2] \\ y_{k+1} = \frac{y_k - \phi x_k}{1 - \phi z_{k+1}} \\ x_{k+1} = x_k + \phi [y_{k+1}] \\ s_{k+1} = \frac{s_k (1 - 2\phi z_{k+1})}{1 - \phi z_{k+1}} \end{array} \right.$$

Porém, nenhum deles consegue gerar soluções dinamicamente válidas. A seção de Poincaré gerada a partir da simulação dos modelos dados pelas eq. (4.25) e (4.24) são idênticas à seção produzida pela simulação do modelo da eq. (4.23) (Figura 30). Para o modelo dado pela eq. (4.26), chega-se na seção de Poincaré mostrada na Figura 31.

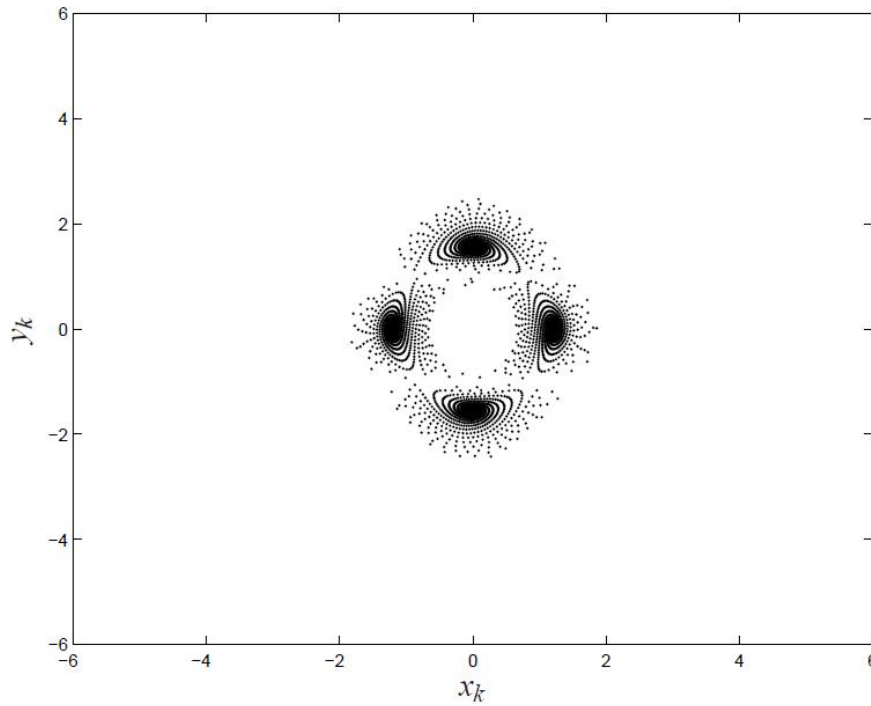


Figura 31: Seção de Poincaré do sistema Sprott-Nosé-Hoover, definida por $P \equiv \{(x, y, s) \in \mathbb{R}^3 \mid z = 0, \dot{z} > 0\}$, usando o modelo discretizado pelo método proposto por Mickens, eq. (4.26), com condição inicial $(x_0 = 0,00; y_0 = 0,10; z_0 = 0,00; s_0 = e^{-0,005})$, $h = 0,01s$ e instante final da simulação $N \approx \frac{120000s}{h}$.

4.2.6 Modelo discretizado de ordem 3 pelo método de Monaco e Normand-Cyrot

Utilizando o método proposto por Monaco e Normand-Cyrot, eq. (2.67) da seção 2.5.3, no sistema Sprott-Nosé-Hoover, eq. (2.44), obtém-se o seguinte modelo de ordem $\eta = 3$:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{k+1} = x + hy - \frac{h^2}{2} (x - yz) \\ \quad - \frac{h^3}{6} (y + z(x - yz) + y(y^2 - 1)) \\ y_{k+1} = y + h(-x + yz) - \frac{h^2}{2} (y + z(x - yz) + y(y^2 - 1)) \\ \quad + \frac{h^3}{6} ((x - yz)(3y^2 - z^2) - yz + (x - 2yz)(y^2 - 1)) \\ z_{k+1} = z + h(1 - y^2) + h^2 y(x - yz) \\ \quad + \frac{h^3}{6} (2y^2(y^2 - 1) - (x - yz)(2x - 4yz) + 2y^2) \\ s_{k+1} = s + h(-sz) + \frac{h^2}{2} (sz^2 + s(y^2 - 1)) \\ \quad - \frac{h^3}{6} (sz(y^2 + z^2 - 1) + 2sy(x - yz) + 2sz(y^2 - 1)) \end{array} \right. \quad (4.26)$$

A seção de Poincaré para o modelo de ordem 3, eq. (4.26), com o passo de discretização $h = 0,0125s$ (Figura 32) é semelhante a seção de Poincaré do sistema contínuo (Figura 28).

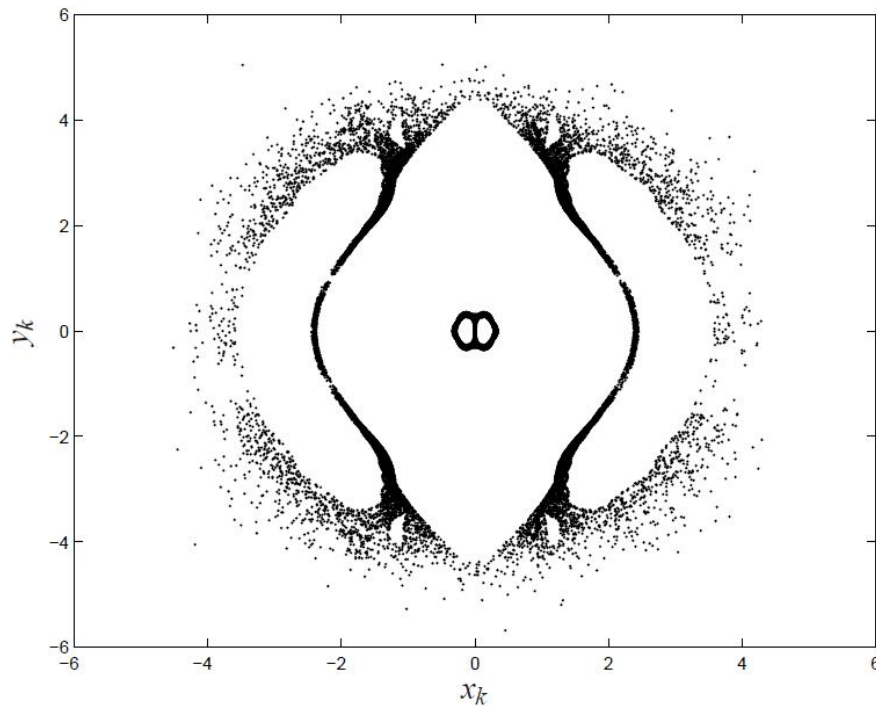


Figura 32: Seção de Poincaré do sistema Sprott-Nosé-Hoover, definida por $P \equiv \{(x, y, s) \in \mathbb{R}^3 \mid z = 0, \dot{z} > 0\}$, usando o modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$, eq. (4.26), com condição inicial $(x_0 = 0,00; y_0 = 0,10; z_0 = 0,00; s_0 = e^{-0,005})$, $h = 0,0125s$ e instante final da simulação $N \approx \frac{120000s}{h}$.

À medida que o passo da discretização h aumenta, a estrutura do modelo de ordem 3 não mais consegue gerar uma solução válida equivalente à do sistema contínuo. Simulações mostram que esta equivalência somente é mantida para $h \leq 0,0150s$. Isto pode ser flagrado analisando-se cortes em $x_k = 0$ da seção de Poincaré para diferentes valores do passo h (Figura 33). Os cortes mostram que a seção de Poincaré começa a desconfigurar-se, preenchendo espaços mais próximos à origem que não eram antes visitados, a partir de $h = 0,0150s$.

Analisando-se a solução do modelo discretizado de ordem 3 com $h = 0,0125s$ sob o aspecto da energia, chega-se aos índices da Tabela 15. μ_H é aproximadamente igual à energia do sistema original para este valor do passo, bem como para outros valores pequenos. As médias da variação de energia (\mathcal{H}_1) e da variação absoluta de energia (\mathcal{H}_2) da simulação são pequenas. Logo, a simulação é aproximadamente conservativa.

À medida que o passo de discretização aumenta, a energia, que era aproximadamente constante e igual ao definido para o sistema contínuo original, passa a ficar cada vez mais longe deste valor (Figura 34). O desvio padrão também aumenta consideravelmente, fato que inclusive demonstra uma instabilidade na energia, pois mostra que ela

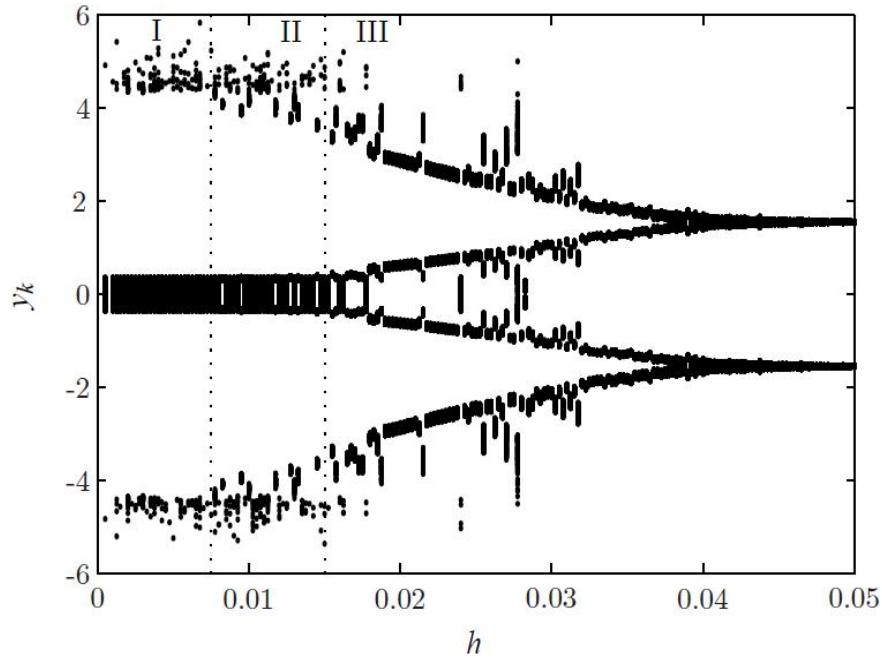


Figura 33: Corte em $x_k = 0$ da seção de Poincaré, definida pela eq. (2.46), da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h . Tem-se o atrator do modelo discretizado na região (I) semelhante ao atrator do sistema contínuo ($0s < h \leq 0,0075s$); (II) semelhante ao atrator do sistema contínuo, mas com algumas instabilidades numéricas para alguns passos de discretização ($0,0075s < h \leq 0,015s$); (III) com predomínio de instabilidades numéricas ($h > 0,015s$).

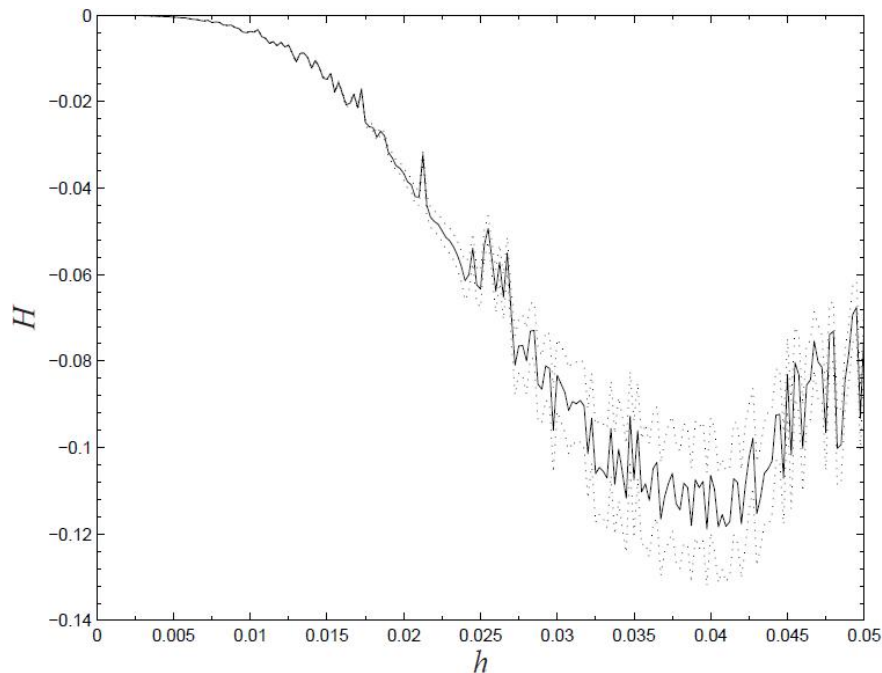


Figura 34: Energia em estado estacionário, eq. (2.43), da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h . (—) μ_H ; (···) $\mu_H \pm \sigma_H$.

varia bastante ao longo da simulação. Esta conclusão pode também ser feita a partir da análise do índice \mathcal{H}_2 (Tabela 15 e Figura 35), visto que este indica uma média variação absoluta da energia por instante k e é cada vez maior à medida que o passo h aumenta.

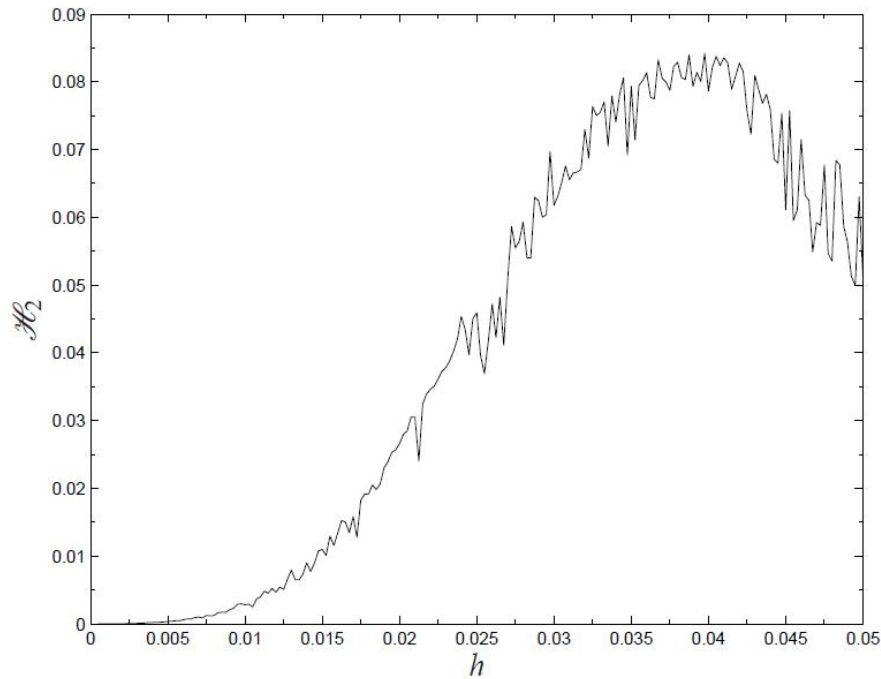


Figura 35: Índice \mathcal{H}_2 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h

Com relação à média da energia para o grupo de termos H_1 , esta diminui à medida que h aumenta, como mostrado na Figura 36 e na Tabela 15. A queda da energia neste grupo de termos explica a razão pela qual ocorre uma mudança visual considerável no atrator a partir de $h = 0,0150$ s. Isso foi mostrado pela análise dos cortes na seção de Poincaré em $x_k = 0$, Figura 33), onde ocorre uma perda significativa dos valores dos termos que compõe a energia a partir deste valor de h .

Analisando-se os valores do produto dos autovalores da matriz jacobiana com o auxílio da Tabela 15, percebe-se que variação da média $\mu_{\mathcal{L}}$ é muito baixa em valor absoluto. Visto que o desvio padrão é insignificante para quaisquer valores de h , o produto não varia ao longo da simulação, independentemente do valor de h . Mesmo assim, ao analisar graficamente o produto dos autovalores do modelo discretizado de ordem 3 para diferentes valores do passo de discretização h (Figura 37), nota-se um decaimento do produto a partir de $h \approx 0,0150$. Assim como outras análises levaram à conclusão de que a energia não se conserva a partir deste valor, o produto dos autovalores pode ser usado também como uma medida para a conservação da energia.

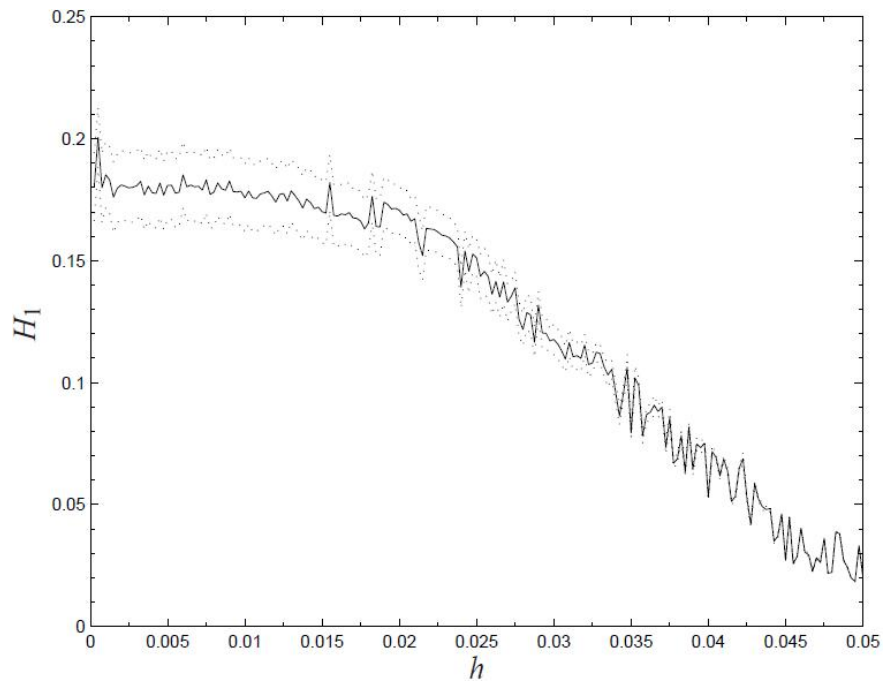


Figura 36: Energia H_1 , eq. (4.16), da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h . (—) μ_{H_1} ; (···) $\mu_{H_1} \pm \sigma_{H_1}$.

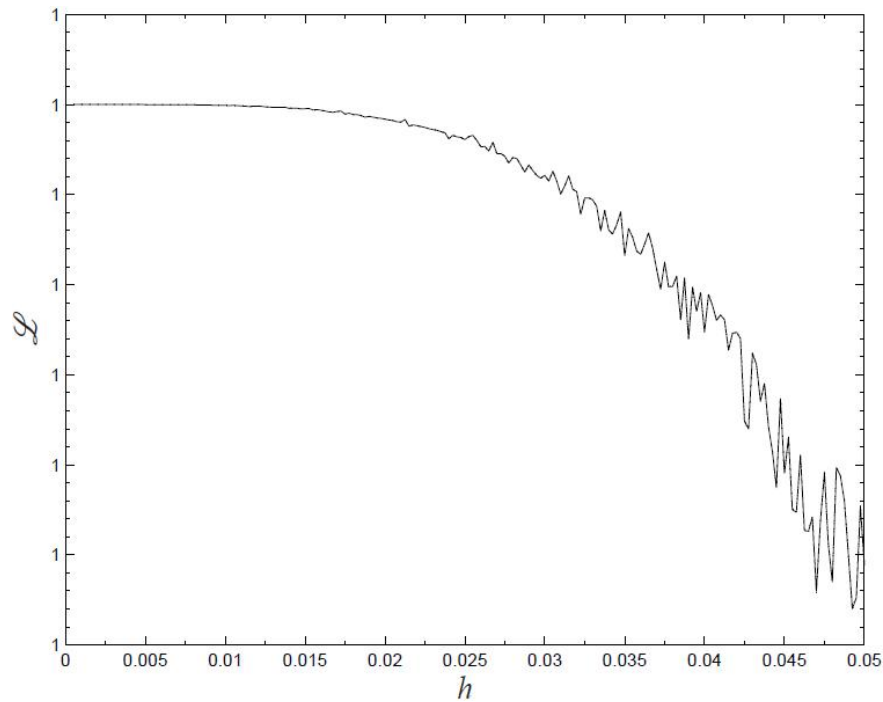


Figura 37: Produto dos autovalores da matriz jacobiana da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h . (—) $\mu_{\mathcal{L}}$; (···) $\mu_{\mathcal{L}} \pm \sigma_{\mathcal{L}}$.

Tabela 15: Energia H , energia para um grupo de termos H_1 , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} , e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 3 do sistema Sprott-Nosé-Hoover.

$h(s)$	H		H_1		\mathcal{L}		\mathcal{H}_1	\mathcal{H}_2
	μ_H	σ_H	μ_{H_1}	σ_{H_1}	$\mu_{\mathcal{L}}$	$\sigma_{\mathcal{L}}$		
0,0050	$-4,648813 \times 10^{-4}$	$2,525234 \times 10^{-7}$	$1,808934 \times 10^{-1}$	$1,400280 \times 10^{-2}$	1,0000000	$5,258372 \times 10^{-16}$	$-1,375585 \times 10^{-6}$	$3,422421 \times 10^{-4}$
0,0075	$-1,691276 \times 10^{-3}$	$3,285800 \times 10^{-6}$	$1,830517 \times 10^{-1}$	$1,360555 \times 10^{-2}$	1,0000000	$8,878170 \times 10^{-15}$	$-1,032592 \times 10^{-6}$	$1,240590 \times 10^{-3}$
0,0100	$-3,771795 \times 10^{-3}$	$1,704677 \times 10^{-5}$	$1,757452 \times 10^{-1}$	$1,387644 \times 10^{-2}$	1,0000000	$5,985175 \times 10^{-14}$	$-8,965014 \times 10^{-6}$	$2,812438 \times 10^{-3}$
0,0125	$-6,942706 \times 10^{-3}$	$5,743420 \times 10^{-5}$	$1,775300 \times 10^{-1}$	$1,341946 \times 10^{-2}$	0,9999999	$7,490813 \times 10^{-13}$	$2,098418 \times 10^{-6}$	$5,118830 \times 10^{-3}$
0,0150	$-1,482051 \times 10^{-2}$	$2,631044 \times 10^{-4}$	$1,700911 \times 10^{-1}$	$1,276523 \times 10^{-2}$	0,9999999	$1,861969 \times 10^{-12}$	$-1,742857 \times 10^{-7}$	$1,099969 \times 10^{-2}$
0,0200	$-3,662279 \times 10^{-2}$	$1,425204 \times 10^{-3}$	$1,706485 \times 10^{-1}$	$9,791581 \times 10^{-3}$	0,9999997	$2,780875 \times 10^{-11}$	$-5,794634 \times 10^{-6}$	$2,657542 \times 10^{-2}$
0,0250	$-6,334033 \times 10^{-2}$	$4,240548 \times 10^{-3}$	$1,510629 \times 10^{-1}$	$7,604886 \times 10^{-3}$	0,9999992	$1,584979 \times 10^{-10}$	$3,496310 \times 10^{-5}$	$4,590430 \times 10^{-2}$
0,0300	$-8,327696 \times 10^{-2}$	$8,362328 \times 10^{-3}$	$1,177196 \times 10^{-1}$	$6,231491 \times 10^{-3}$	0,9999984	$5,915128 \times 10^{-10}$	$-1,682610 \times 10^{-6}$	$6,176675 \times 10^{-2}$
0,0400	$-1,064344 \times 10^{-1}$	$1,329068 \times 10^{-2}$	$5,320002 \times 10^{-2}$	$1,502394 \times 10^{-3}$	0,9999950	$6,246545 \times 10^{-9}$	$2,284196 \times 10^{-6}$	$7,861608 \times 10^{-2}$
0,0450	$-8,312216 \times 10^{-2}$	$8,416170 \times 10^{-3}$	$2,710915 \times 10^{-2}$	$4,715403 \times 10^{-4}$	0,9999918	$1,771695 \times 10^{-8}$	$8,079536 \times 10^{-6}$	$6,111778 \times 10^{-2}$
0,0500	$-7,219088 \times 10^{-2}$	$5,474932 \times 10^{-3}$	$2,067011 \times 10^{-2}$	$2,248057 \times 10^{-4}$	0,9999898	$2,371872 \times 10^{-8}$	$5,414994 \times 10^{-5}$	$5,089758 \times 10^{-2}$

Os expoentes de Lyapunov calculados para o modelo discretizado de ordem 3 para o sistema Sprott-Nosé-Hoover estão mostrados na Tabela 16. Existe simetria entre os expoentes λ_1 e λ_4 , mas o distanciamento maior entre λ_2 e λ_3 mostra o contrário para estes dois expoentes. Como este não é um sistema hamiltoniano, era de se esperar esta falta de simetria (seção 4.2.4). Porém, por ser conservativo, consegue manter o somatório dos expoentes \mathcal{V} próximo de zero. À medida que h aumenta, \mathcal{V} decai de forma similar ao produto dos autovalores da matriz jacobiana e da energia, como mostrado na Figura 38. Os expoentes conseguem indicar corretamente que o sistema encontra-se em dinâmica caótica, pois os sinais dos expoentes são $(+, 0, -, -)$.

Tabela 16: Expoentes de Lyapunov, somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 3 do sistema Sprott-Nosé-Hoover.

$h(s)$	$\lambda_1, \lambda_4, \lambda_2, \lambda_3$	$\mathcal{V} = \sum_{i=1}^4 \lambda_i$	D_{KY}
0,0050	-0,0007868267	$-9,92199565 \times 10^{-10}$	3,9999987390
	0,0008078698		
	-0,0000210378		
	-0,0000000063		
0,0075	-0,0000486570	$-6,44437217 \times 10^{-9}$	3,9998675552
	0,0000960821		
	-0,0000474347		
	0,0000000032		
0,0100	-0,0003525776	$-1,99958998 \times 10^{-8}$	3,9999432865
	0,0004421729		
	-0,0000896343		
	0,0000000189		
0,0125	-0,0001442021	$-5,37053194 \times 10^{-8}$	3,9996275690
	0,0001188779		
	0,0000000127		
	0,0000252577		
0,0150	-0,0002005438	$-1,18996338 \times 10^{-7}$	3,9994066316
	0,0003487697		
	-0,0001483980		
	0,0000000530		
0,0200	-0,0003625922	$-3,72929276 \times 10^{-7}$	3,9989714912
	0,0003691679		
	-0,0000070776		
	0,0000001290		

A fim de investigar a simetria dos expoentes, simulou-se o sistema termostático Nosé-Hoover, com condição inicial dada pela eq. (4.18). Os expoentes de Lyapunov estão na Tabela 17. Para qualquer valor do passo de discretização, tem-se $\lambda_1 \approx -\lambda_4$ e $\lambda_2 \approx -\lambda_3 \approx 0,00$.

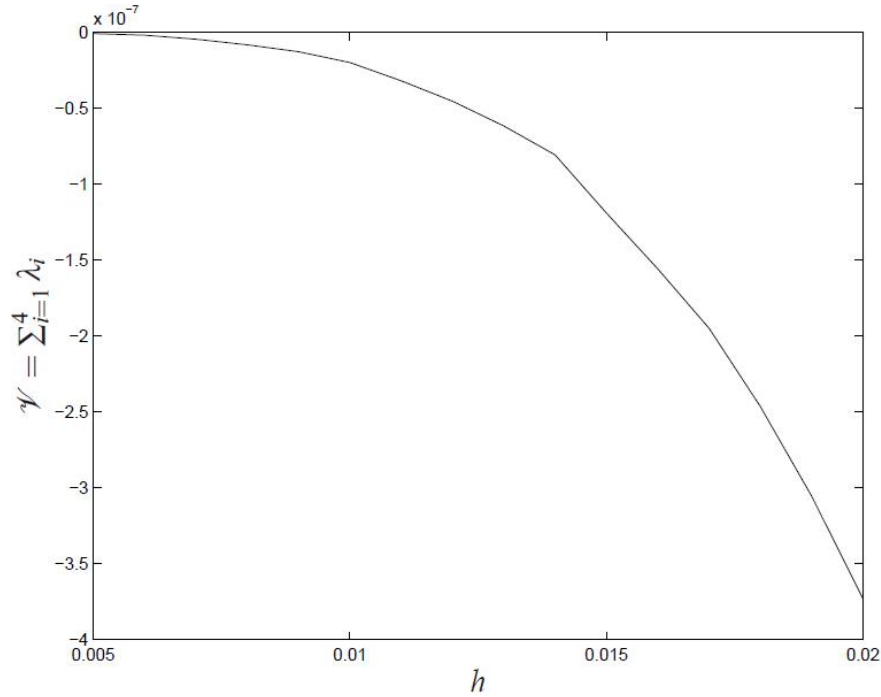


Figura 38: Somatório dos expoentes de Lyapunov para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h .

Tabela 17: Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 3 do sistema termostático Nosé-Hoover.

$h(s)$	$\lambda_1, \lambda_4, \lambda_2, \lambda_3$	$\frac{\max(\lambda_i , \lambda_{5-i})}{\min(\lambda_i , \lambda_{5-i})}$	$\sum_{i=1}^4 \lambda_i$	D_{KY}
0,0050	-0,2030005310	1,0000615488	$-1,71120448 \times 10^{-4}$	3,9991570443
	0,2029880374			
	-0,0001486988	14,9777197903		
	-0,0000099280			
0,0075	-0,3588730899	1,0000773318	$-6,25108821 \times 10^{-5}$	3,9998258134
	0,3588453398			
	-0,0000224114	1,8147770953		
	-0,0000123494			
0,0100	-0,3809921936	1,0001331721	$1,64508588 \times 10^{-5}$	4,0000000000
	0,3809414628			
	-0,0000399773	2,6804955493		
	0,0001071589			
0,0125	-0,4637589857	1,0001687083	$-1,69588394 \times 10^{-4}$	3,9996343178
	0,4636807589			
	-0,0000624424	2,1591983071		
	-0,0000289192			
0,0150	-0,5008223322	1,0002207717	$2,12413792 \times 10^{-4}$	4,0000000000
	0,5007117892			
	-0,0000898216	4,5955354571		
	0,0004127784			
0,0200	-0,5440412015	1,0003653479	$-2,19653085 \times 10^{-5}$	3,9999596257
	0,5438425098			
	-0,0001594061	2,1086554157		
	0,0003361324			

4.2.7 Modelo discretizado de ordem 8 pelo método de Monaco e Normand-Cyrot

Para se conseguir obter uma simulação com um modelo discretizado dinamicamente válido com passos de discretização maiores, deve-se utilizar modelos de ordem mais elevada para melhorar a aproximação com o sistema contínuo. A simulação do modelo de ordem 8 com o passo de discretização $h = 0,09s$ é caracterizada pela seção de Poincaré mostrada na Figura 39 (item *a*), a qual continua sendo semelhante a seção de Poincaré do sistema contínuo, mesmo sendo igual ao passo máximo dado pela frequência de Nyquist.

Nestas condições, para o modelo de ordem 8 e com $h = 0,09s$, a média, o desvio padrão da energia e os índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 são mostrados na Tabela 18. Como a energia do sistema em questão é igual a zero, eq. (2.43), o modelo discretizado de ordem 8 para $h = 0,09s$ se manteve mais próximo do que o modelo discretizado de ordem 3 para $h = 0,0125s$, pois a média da energia foi mais próxima da energia do sistema contínuo e o desvio padrão foi menor. As médias da variação da energia (\mathcal{H}_1) e da variação absoluta da energia (\mathcal{H}_2), que levam em consideração um mesmo período de tempo, também foram menores. Comparando-se os resultados para o modelo de ordem 3 (Tabela 15) e o de ordem 8 (Tabela 18), pode-se concluir que todos os índices são melhores para o modelo de mais alta ordem.

A similaridade com a seção de Poincaré do sistema original ainda consegue ser mantida ao se aumentar o passo da discretização h . A Figura 40 mostra um corte em $x_k = 0$ da seção de Poincaré de simulações do modelo discretizado de ordem 8 para diferentes valores de h . Para valores baixos de h , os pontos ficam concentrados nos intervalos $[4,2; 5,2]$, $[-0,35; 0,35]$ e $[-5,2; -4,2]$. Mas para valores mais elevados de h , $h \approx 0,2s$, os pontos ficam concentrados nos intervalos $[3,6; 4,6]$, $[-0,35; 0,35]$ e $[-4,6; -3,6]$. Os pontos dos extremos da seção migraram de $[\pm 4,2; \pm 5,2]$ para $[\pm 3,6; \pm 4,6]$, indicando que estão lentamente se aproximando da origem. Logo, à medida que h aumenta, a seção de Poincaré diminui.

A energia vai lentamente se distanciando do zero à medida que o passo aumenta, como mostrado na Figura 41. O modelo, portanto, começa a deixar de ser conservativo a partir de $h = 0,152s$.

A fim de se analisar a não conservação e tentar entender um pouco mais sobre o fato da diminuição da seção de Poincaré, analisou-se também a energia absoluta para o grupo de termos H_1 , como mostrado na Figura 42. A média do grupo de termos foi dada

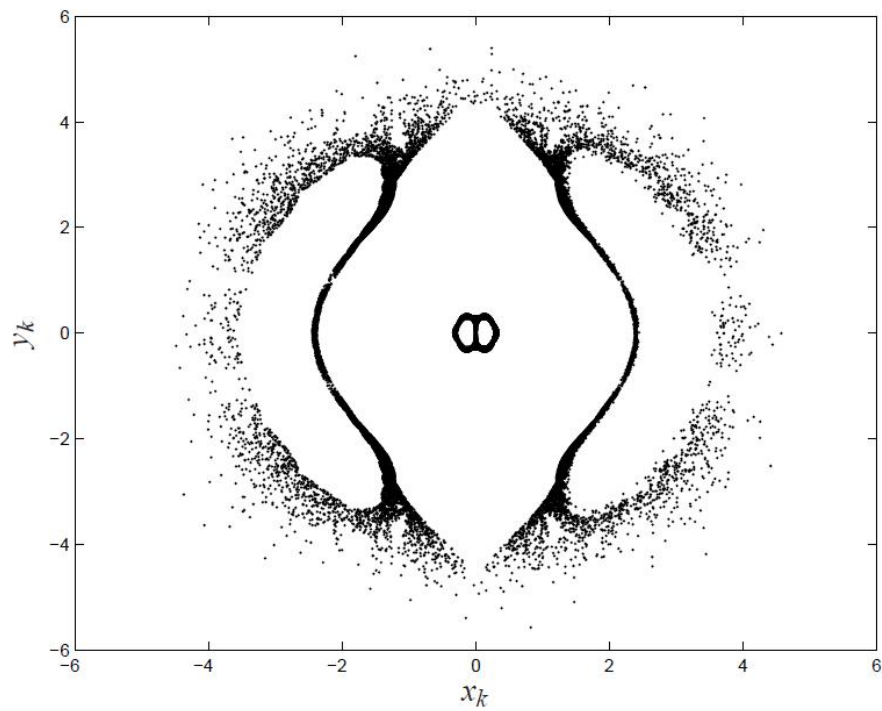
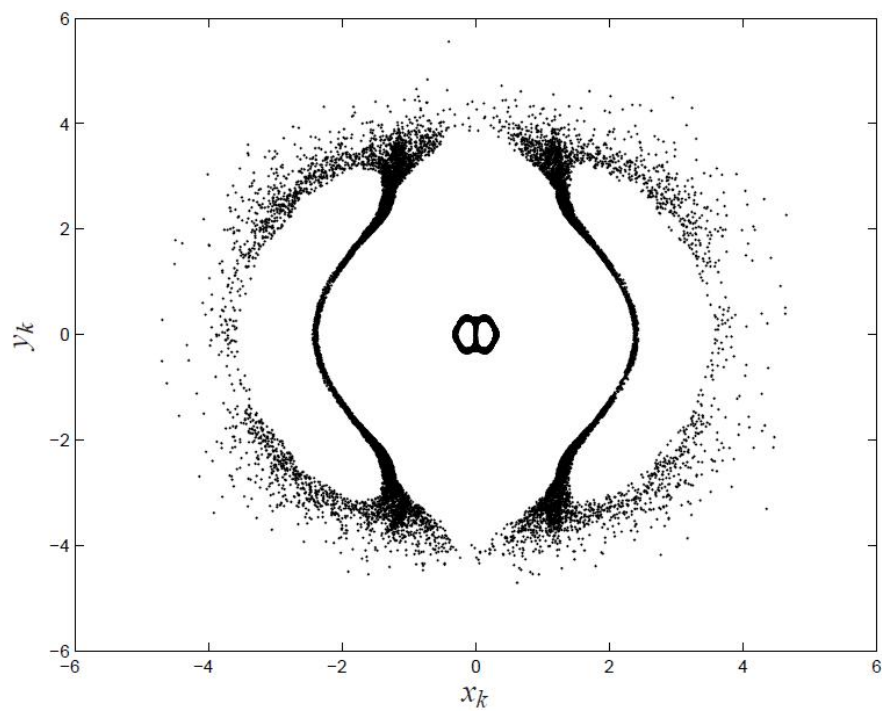
(a) $h = 0,09s$ (b) $h = 0,23s$

Figura 39: Seção de Poincaré do sistema Sprott-Nosé-Hoover, definida por $P \equiv \{(x, y, s) \in \mathbb{R}^3 \mid z = 0, \dot{z} > 0\}$, usando o modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$, com condição inicial $(x_0 = 0,00; y_0 = 0,10; z_0 = 0,00; s_0 = e^{-0,005})$, e instante final da simulação $N \approx \frac{120000s}{h}$. Simetria presente em $x_k = 0$ e $y_k = 0$.

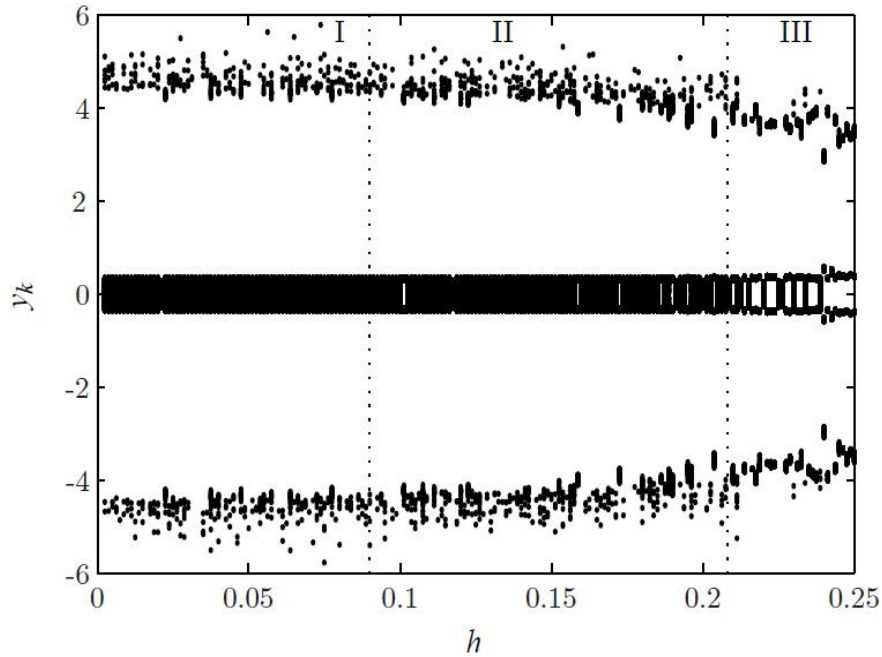


Figura 40: Corte em $x_k = 0$ da seção de Poincaré, definida pela eq. (2.46), da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 3$ do sistema SprottA em função do passo h . Tem-se o atrator do modelo discretizado na região (I) semelhante ao atrator do sistema contínuo ($0s < h \leq 0,09s$); (II) levemente menor que o atrator do sistema contínuo, mas com algumas instabilidades numéricas para alguns passos de discretização ($0,09s < h \leq 0,152s$); (III) menor e com predomínio de instabilidades numéricas ($h > 0,152s$).

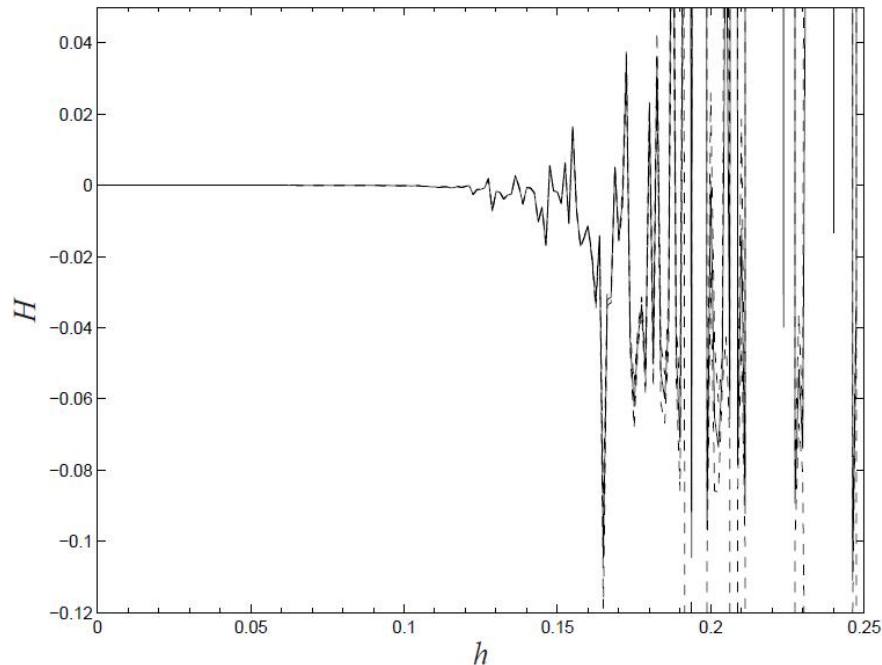


Figura 41: Energia em estado estacionário, eq. (2.43), da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h . (—) μ_H ; (---) $\mu_H \pm \sigma_H$.

pela eq. (3.18), sendo o grupo de termos H_1 dado pela eq. (4.16), e, como mencionado na seção 3.2.5, serve para verificar se ocorre perda de energia por meio de alguma variável em

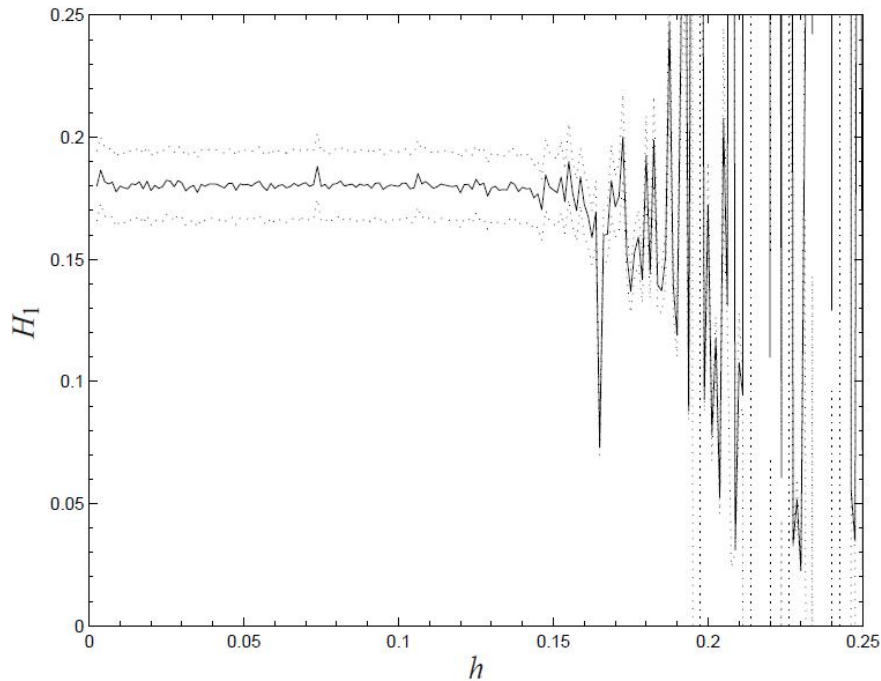


Figura 42: Energia H_1 , eq. (4.16), da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h . (—) μ_{H_1} ; (···) $\mu_{H_1} \pm \sigma_{H_1}$.

funções hamiltonianas que tenha valor constante e igual a zero. Não há perda significativa da energia absoluta, pois a média da energia do grupo de termos H_1 é aproximadamente constante para os diversos valores de h . Somente para $h > 0,152s$ ocorre uma perda mais significativa desta energia, o que coincide com o momento do passo h em que começa a ocorrer a degradação da seção de Poincaré.

Com relação ao produto dos autovalores da matriz jacobiana, análise similar feita para o modelo de ordem 3 pode ser aplicada para o modelo de ordem 8. Esta pode ser realizada fazendo-se um gráfico do produto em função do passo de discretização h (Figura 43) em conjunto a Tabela 18. Praticamente não ocorre variação da média do produto para os diferentes valores do passo h . O desvio padrão é insignificante para valores do passo abaixo da frequência de Nyquist, mostrando que o produto não varia ao longo da simulação para qualquer valor de h neste intervalo. Apenas para $h \approx 0,152s$ é que o produto começa a oscilar, começando a sinalizar uma não conservação da energia. A mesma conclusão pode ser obtida a partir da análise da energia para o grupo de termos (Figura 42).

A variação do índice \mathcal{H}_1 para diferentes passos de discretização (Figura 44) mostra que a energia inicial não se altera substancialmente com relação à final até $h \approx 0,19s$. Apesar disto, a média da energia decai antes deste valor, mostrando que este índice não é uma boa medida da conservação da energia e pode ser analisado sozinho.

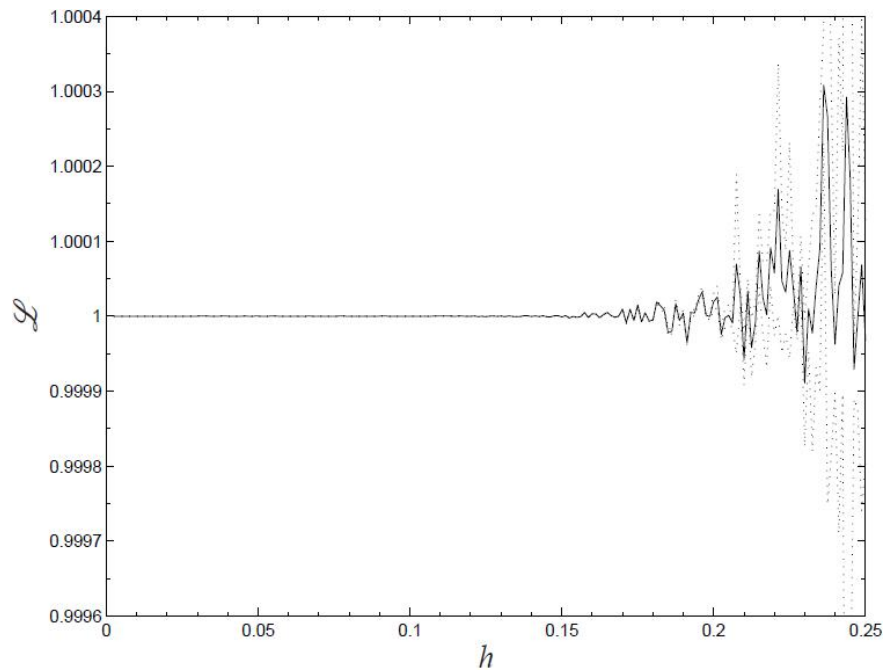


Figura 43: Produto dos autovalores da matriz jacobiana da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h . (—) $\mu_{\mathcal{L}}$; (···) $\mu_{\mathcal{L}} \pm \sigma_{\mathcal{L}}$.

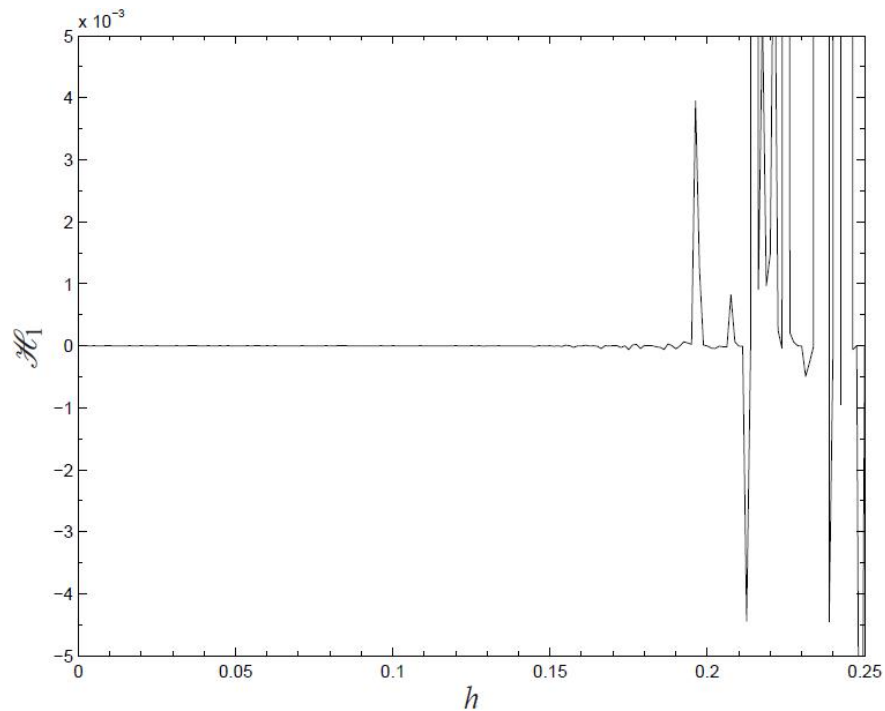


Figura 44: Índice \mathcal{H}_1 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h

O gráfico do índice \mathcal{H}_2 em função do passo de discretização (Figura 45) mostra que a variação da energia absoluta da energia cresce com o aumento do passo h . O modelo de ordem 8 consegue $\mathcal{H}_2 \approx 2,5 \times 10^{-2}$ em $h = 0,152s$, resultado similar foi obtido com o modelo de ordem 3 em $h = 0,02s$. Logo, mostra-se que o modelo de mais alta ordem

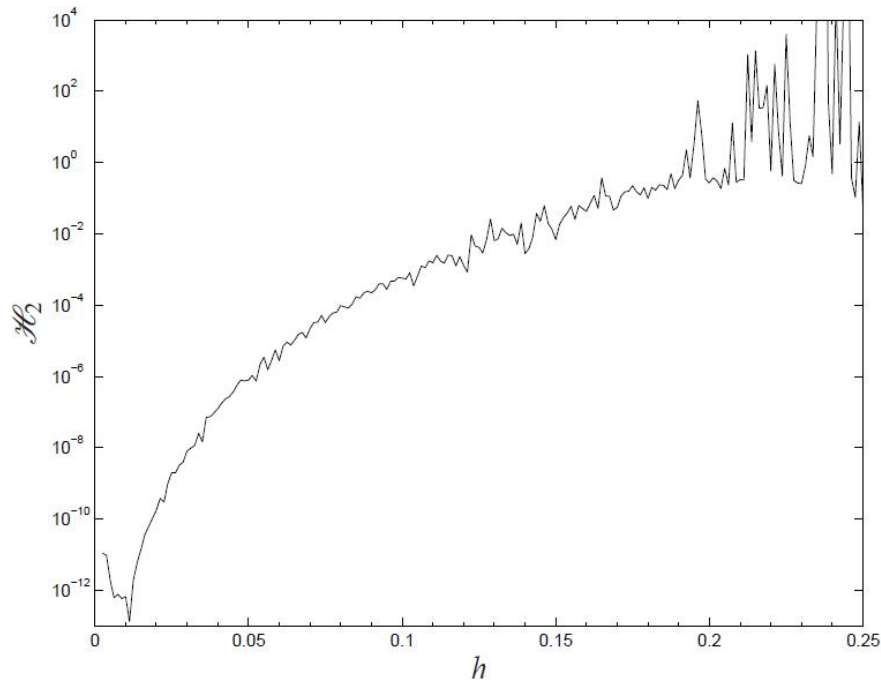


Figura 45: Índice \mathcal{H}_2 da simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h

consegue diminuir a variação da energia absoluta da energia a cada instante k da simulação.

Até $h = 0,23s$ conseguiu-se obter soluções em que a simetria da seção de Poincaré foi mantida, como mostrado na Figura 39 (item *b*). Porém, nesta situação, o atrator é levemente menor e perdeu alguns detalhes da seção original por não estar mais atendendo ao critério de Nyquist. A diminuição do tamanho do atrator pode ser percebida pelo achatamento da seção de Poincaré mostrada no corte em $x_k = 0$ para valores elevados de h (Figura 40). A perda dos detalhes é melhor percebida pelas quatro pequenas ilhas em $(x_k, y_k) \approx (\pm 1, 5; \pm 4, 0)$ que desaparecem quando se está em $h = 0,23s$. Note que não ocorre sobreposição para as frequências da variável y na simulação com $h = 0,09s$ (Figura 46, item *a*). Para $h = 0,23s$ (Figura 46, item *b*), há forte efeito de borda devido a sobreposição de altas frequências.

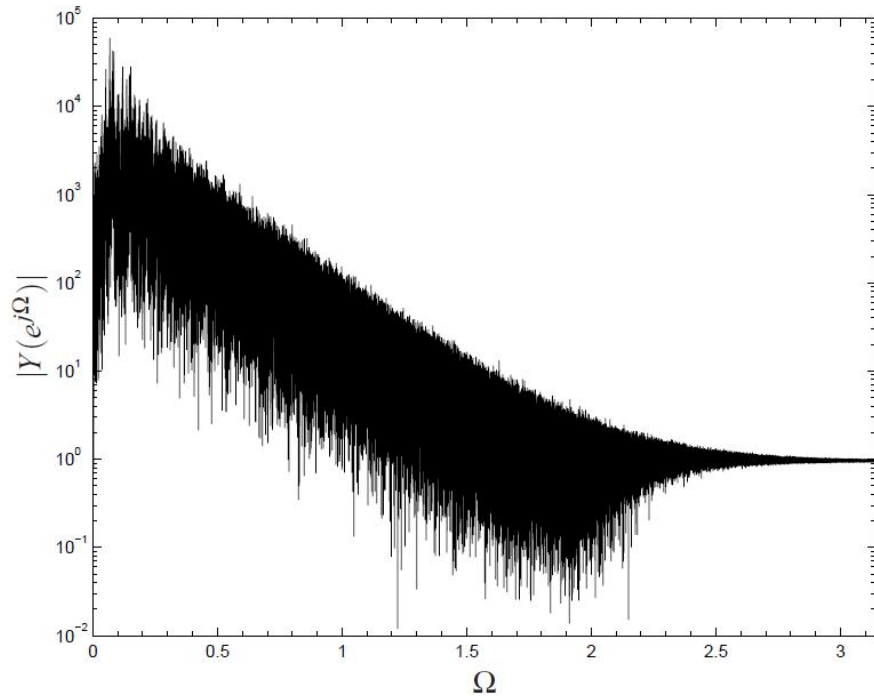
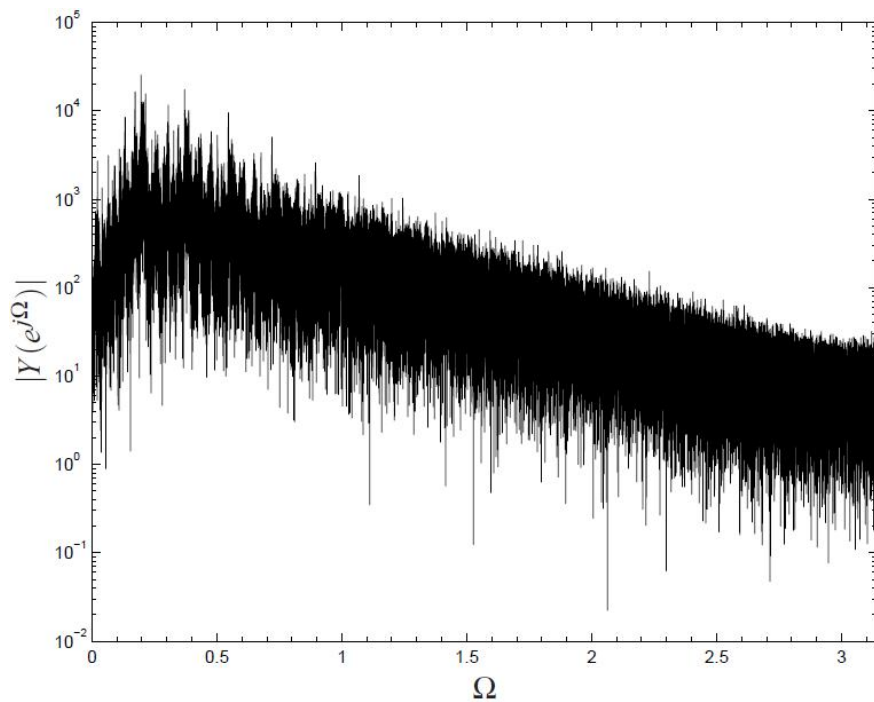
(a) $h = 0,09s$ (b) $h = 0,23s$

Figura 46: Frequências da variável y do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover, com as condição inicial $(x_0 = 0,00; y_0 = 0,10; z_0 = 0,00; s_0 = e^{-0,005})$.

Tabela 18: Energia H , energia para um grupo de termos H_1 , produto dos autovalores da matriz jacobiana \mathcal{L} , e índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 8 do sistema Sprott-Nosé-Hoover.

$h(s)$	H		H_1		\mathcal{L}		\mathcal{H}_1	\mathcal{H}_2
	μ_H	σ_H	μ_{H_1}	σ_{H_1}	$\mu_{\mathcal{L}}$	$\sigma_{\mathcal{L}}$		
0,00500	$5,084938 \times 10^{-13}$	$3,002773 \times 10^{-25}$	$1,818174 \times 10^{-1}$	$1,405883 \times 10^{-2}$	1,0000000	$4,960664 \times 10^{-31}$	$1,282514 \times 10^{-15}$	$1,879244 \times 10^{-12}$
0,0100	$1,808570 \times 10^{-13}$	$4,150884 \times 10^{-26}$	$1,799915 \times 10^{-1}$	$1,412231 \times 10^{-2}$	1,0000000	$4,494705 \times 10^{-29}$	$2,179934 \times 10^{-15}$	$6,714428 \times 10^{-13}$
0,0150	$-3,815326 \times 10^{-12}$	$1,777103 \times 10^{-23}$	$1,805773 \times 10^{-1}$	$1,411126 \times 10^{-2}$	1,0000000	$9,941442 \times 10^{-26}$	$-1,347848 \times 10^{-14}$	$1,409974 \times 10^{-11}$
0,0200	$-4,773946 \times 10^{-11}$	$2,705184 \times 10^{-21}$	$1,781769 \times 10^{-1}$	$1,411563 \times 10^{-2}$	1,0000000	$2,414198 \times 10^{-24}$	$4,980244 \times 10^{-15}$	$1,782004 \times 10^{-10}$
0,0250	$-5,369345 \times 10^{-10}$	$3,430676 \times 10^{-19}$	$1,823811 \times 10^{-1}$	$1,391555 \times 10^{-2}$	1,0000000	$5,939265 \times 10^{-22}$	$7,380221 \times 10^{-14}$	$1,980175 \times 10^{-9}$
0,0300	$-2,204550 \times 10^{-9}$	$5,922219 \times 10^{-18}$	$1,812818 \times 10^{-1}$	$1,404972 \times 10^{-2}$	1,0000000	$1,584992 \times 10^{-20}$	$-1,099365 \times 10^{-11}$	$8,111584 \times 10^{-9}$
0,0350	$-3,947622 \times 10^{-9}$	$1,882149 \times 10^{-17}$	$1,774032 \times 10^{-1}$	$1,412882 \times 10^{-2}$	1,0000000	$7,826039 \times 10^{-21}$	$8,079858 \times 10^{-14}$	$1,475991 \times 10^{-8}$
0,0400	$-3,352776 \times 10^{-8}$	$1,489148 \times 10^{-15}$	$1,808883 \times 10^{-1}$	$1,404759 \times 10^{-2}$	1,0000000	$2,906517 \times 10^{-18}$	$-1,755675 \times 10^{-10}$	$1,237406 \times 10^{-7}$
0,0450	$-9,897502 \times 10^{-8}$	$1,252839 \times 10^{-14}$	$1,810527 \times 10^{-1}$	$1,405717 \times 10^{-2}$	1,0000000	$2,173867 \times 10^{-17}$	$2,912083 \times 10^{-12}$	$3,643716 \times 10^{-7}$
0,0500	$-2,145310 \times 10^{-7}$	$6,275537 \times 10^{-14}$	$1,805377 \times 10^{-1}$	$1,411727 \times 10^{-2}$	1,0000000	$1,172466 \times 10^{-16}$	$-4,808086 \times 10^{-12}$	$7,905919 \times 10^{-7}$
0,0600	$-7,475890 \times 10^{-7}$	$8,217066 \times 10^{-13}$	$1,790637 \times 10^{-1}$	$1,413457 \times 10^{-2}$	1,0000000	$2,045923 \times 10^{-15}$	$2,094958 \times 10^{-11}$	$2,762184 \times 10^{-6}$
0,0700	$-5,915956 \times 10^{-6}$	$5,588224 \times 10^{-11}$	$1,814216 \times 10^{-1}$	$1,405337 \times 10^{-2}$	1,0000000	$9,904350 \times 10^{-14}$	$-1,486580 \times 10^{-9}$	$2,170311 \times 10^{-5}$
0,0800	$-2,657424 \times 10^{-5}$	$9,664562 \times 10^{-10}$	$1,809770 \times 10^{-1}$	$1,409287 \times 10^{-2}$	1,0000000	$6,204945 \times 10^{-13}$	$-2,065650 \times 10^{-9}$	$9,753771 \times 10^{-5}$
0,0900	$-6,072460 \times 10^{-5}$	$5,425345 \times 10^{-9}$	$1,806379 \times 10^{-1}$	$1,409882 \times 10^{-2}$	1,0000000	$5,787483 \times 10^{-12}$	$-7,496382 \times 10^{-9}$	$2,223823 \times 10^{-4}$
0,1000	$-1,580585 \times 10^{-4}$	$3,769886 \times 10^{-8}$	$1,798773 \times 10^{-1}$	$1,413666 \times 10^{-2}$	1,0000000	$3,485844 \times 10^{-11}$	$5,796269 \times 10^{-8}$	$5,785989 \times 10^{-4}$
0,1100	$-4,210145 \times 10^{-4}$	$2,682841 \times 10^{-7}$	$1,805183 \times 10^{-1}$	$1,408236 \times 10^{-2}$	1,0000001	$2,947622 \times 10^{-10}$	$-1,862625 \times 10^{-7}$	$1,536115 \times 10^{-3}$
0,1200	$-3,558274 \times 10^{-4}$	$1,593068 \times 10^{-7}$	$1,771874 \times 10^{-1}$	$1,409671 \times 10^{-2}$	1,0000000	$3,721668 \times 10^{-11}$	$1,313394 \times 10^{-8}$	$1,311615 \times 10^{-3}$
0,1400	$-6,259512 \times 10^{-4}$	$1,635910 \times 10^{-6}$	$1,795124 \times 10^{-1}$	$1,407971 \times 10^{-2}$	0,9999996	$1,217913 \times 10^{-8}$	$-1,121770 \times 10^{-7}$	$2,782963 \times 10^{-3}$
0,1600	$-1,152396 \times 10^{-2}$	$1,811197 \times 10^{-4}$	$1,725914 \times 10^{-1}$	$1,306891 \times 10^{-2}$	1,0000033	$1,992186 \times 10^{-7}$	$-2,773572 \times 10^{-6}$	$4,230107 \times 10^{-2}$
0,18000	$2,190183 \times 10^{-2}$	$1,685158 \times 10^{-3}$	$1,925266 \times 10^{-1}$	$1,627606 \times 10^{-2}$	0,9999948	$8,181085 \times 10^{-7}$	$6,342732 \times 10^{-6}$	$9,842321 \times 10^{-2}$
0,20000	$1,104847 \times 10^{-3}$	$2,480224 \times 10^{-2}$	$1,721348 \times 10^{-1}$	$1,762790 \times 10^{-2}$	1,0000192	$1,102437 \times 10^{-5}$	$-1,672508 \times 10^{-6}$	$2,680655 \times 10^{-1}$
0,23000	$-7,395755 \times 10^{-2}$	$7,064810 \times 10^{-3}$	$2,262394 \times 10^{-2}$	$4,563596 \times 10^{-4}$	9,9991086	$8,485057 \times 10^{-5}$	$-3,737022 \times 10^{-6}$	$2,585170 \times 10^{-1}$

A Tabela 19 mostra os expoentes de Lyapunov para o modelo discretizado de ordem 8 do sistema Sprott-Nosé-Hoover. Não existe simetria nos expoentes, sendo um expoente positivo, dois negativos e um aproximadamente zero para valores pequenos de h . Portanto, a dinâmica caótica é corretamente caracterizada para valores baixos de h . Mas, à medida que h aumenta, o expoente igual a zero cresce e não pode mais ser considerado nulo. O somatório $\mathcal{V} \approx 0$ mostra que o modelo discretizado consegue conservar a energia para qualquer valor do passo de discretização. À medida que o passo aumenta, o somatório dos expoentes diminui, mostrado graficamente na Figura 47. Este índice é bem mais próximo de zero para o modelo de ordem 8 do que para o modelo de ordem 3, o que mostra que o modelo de mais alta ordem consegue conservar mais a energia.

Tabela 19: Expoentes de Lyapunov, somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 8 do sistema Sprott-Nosé-Hoover.

$h(s)$	$\lambda_1, \lambda_4, \lambda_2, \lambda_3$	$\mathcal{V} = \sum_{i=1}^4 \lambda_i$	D_{KY}
0,0100	-0,0000877385	$-3,93023288 \times 10^{-18}$	4,0000000000
	0,0001538980		
	-0,0000661613		
	0,0000000019		
0,0200	-0,0003575470	$-2,49502025 \times 10^{-16}$	4,0000000000
	0,0005364616		
	-0,0001790641		
	0,0000001495		
0,0500	-0,0022296275	$-7,79009902 \times 10^{-12}$	3,9999999965
	0,0023999674		
	-0,0001756276		
	0,0000052876		
0,0900	-0,0070354821	$-2,53201784 \times 10^{-9}$	3,9999996401
	0,0079419169		
	-0,0009643697		
	0,0000579324		
0,1000	-0,0086293352	$-5,34070888 \times 10^{-9}$	3,9999993811
	0,0091776199		
	-0,0006338413		
	0,0000855513		
0,1500	-0,0186962330	$5,49987120 \times 10^{-7}$	4,0000000000
	0,0207037428		
	-0,0024203587		
	0,0004133989		
0,2000	-0,0332090806	$-5,61889337 \times 10^{-5}$	3,9983080250
	0,0338809327		
	-0,0020753771		
	0,0013473360		

A simetria dos expoentes pode ser verificada analisando-se os expoentes de Lyapunov para o sistema Hamiltoniano original. A Tabela 20 evidencia a simetria dos expoentes para o sistema Nosé-Hoover calculados para o modelo de ordem 8, sendo $\lambda_1 \approx \lambda_4$ e $\lambda_2 \approx$

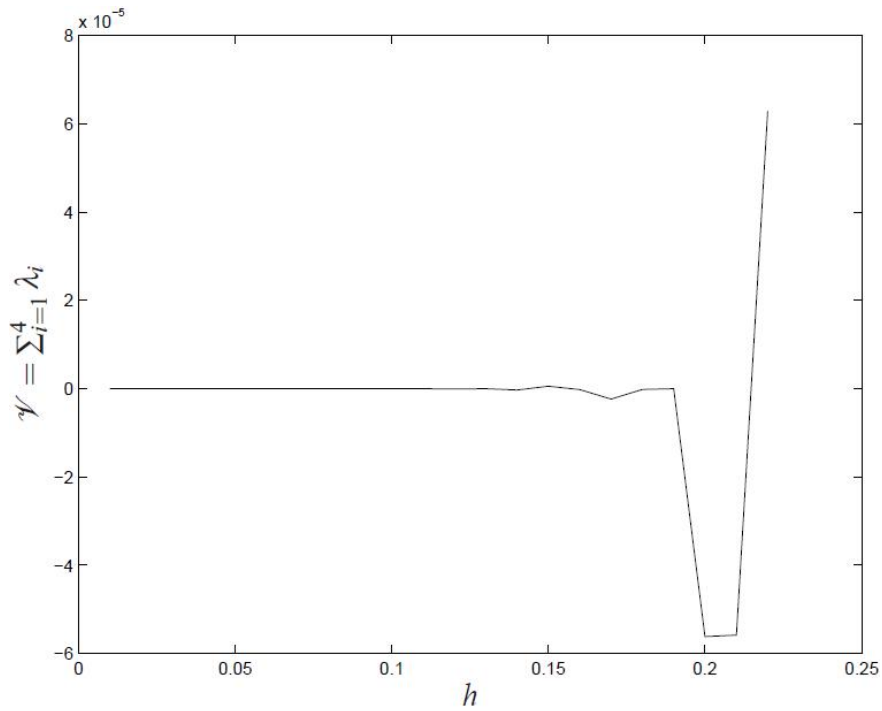


Figura 47: Somatório dos expoentes de Lyapunov para a simulação do modelo discretizado pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem $\eta = 8$ do sistema Sprott-Nosé-Hoover em função do passo h .

$\lambda_3 \approx 0,00$. Dessa forma, percebe-se ainda que os expoentes calculados para o modelo discretizado possuem os sinais $(+, 0, 0, -)$ e corretamente caracterizam a dinâmica caótica do sistema. O somatório dos expoentes é próximo de zero, mostrando que o sistema é conservativo. Porém, o somatório dos expoentes é bem menor para o modelo discretizado do sistema Sprott-Nosé-Hoover. Tal fato pode ser explicado pela ordem de grandeza dos expoentes de Lyapunov e, conseqüentemente, dos elementos da matriz jacobiana, que é bem menor no sistema Sprott-Nosé-Hoover, portanto, resulta em um somatório bem menos expressivo.

4.2.8 Comparação entre os métodos e comentários adicionais

Os modelos gerados pela aplicação do método proposto por Mickens não conseguiram gerar modelos discretizados dinamicamente válidos para nenhum passo de discretização.

O modelo MNC de baixa ordem, $\eta = 3$, conseguiu gerar soluções dinamicamente válidas até $h = 0,0150$ s. O de alta ordem, $\eta = 8$, conseguiu gerar soluções dinamicamente válidas até $h = 0,152$ s. O modelo MNC de alta ordem conseguiu melhores indicadores para a conservação da energia em todos os casos, mantendo sempre a energia mais próxima da

Tabela 20: Expoentes de Lyapunov, índice de simetria dos expoentes \mathcal{S} , somatório dos expoentes de Lyapunov \mathcal{V} e dimensão de Kaplan-Yorke calculados para os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot até a ordem 8 do sistema termostático Nosé-Hoover.

$h(s)$	$\lambda_1, \lambda_4, \lambda_2, \lambda_3$	$\frac{\max(\lambda_i , \lambda_{5-i})}{\min(\lambda_i , \lambda_{5-i})}$	$\sum_{i=1}^4 \lambda_i$	D_{KY}
0,0100	-0,2981938842	1,0001676390	$-3,42231414 \times 10^{-4}$	3,9988523191
	0,2981439036			
	-0,0002525395	6,3593832484		
	-0,0000397113			
0,0200	-0,5334699323	1,0003808058	$3,31209996 \times 10^{-5}$	4,0000000000
	0,5332668612			
	-0,0001598509	2,4775778820		
	0,0003960430			
0,0500	-0,8422160888	1,0015005821	$-2,68449341 \times 10^{-4}$	3,9996812584
	0,8409541681			
	-0,0009961683	1,9972927495		
	0,0019896397			
0,0900	-1,1244279429	1,0037034295	$-2,68228645 \times 10^{-4}$	3,9997614532
	1,1202790684			
	-0,0032083124	2,2095598652		
	0,0070889583			
0,1000	-1,1906587354	1,0043442702	$-2,88013876 \times 10^{-4}$	3,9997581054
	1,1855085659			
	-0,0039561525	2,2290111716		
	0,0088183082			
0,1500	-1,3501223622	1,0089636137	$-2,06553424 \times 10^{-4}$	3,9998470113
	1,3381279007			
	-0,0087326890	2,3498600700		
	0,0205205972			
0,2000	-1,5715384668	1,0144218455	$-2,43357730 \times 10^{-4}$	3,9998451468
	1,5491961985			
	-0,0153539936	2,4392939764		
	0,0374529041			

original, o produto dos autovalores da matriz jacobiana mais próximo de 1,00, os índices \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 mais baixos, o somatório dos expoentes de Lyapunov mais próximos de zero e a dimensão de Kaplan-Yorke mais próxima do valor dado pelo sistema contínuo original.

Com relação ao critério simpleticidade para os modelos MNC de ordens 3 e 8 do sistema Nosé-Hoover, tem-se:

$$\mathcal{W}^{\eta=3} = \left(J_k^{MNC, \eta=3} \right)^T W J_k^{MNC, \eta=3} = W + \tilde{W}^{\eta=3} \quad (4.27)$$

$$\mathcal{W}^{\eta=8} = \left(J_k^{MNC, \eta=8} \right)^T W J_k^{MNC, \eta=8} = W + \tilde{W}^{\eta=8} \quad (4.28)$$

onde $J_k^{MNC, \eta=3}$ e $J_k^{MNC, \eta=8}$ são as matrizes jacobianas dos modelos MNC de ordens 3 e 8, respectivamente, W é a matriz da eq. (4.11), $\tilde{W}^{\eta=3}$ tem a mesma estrutura da matriz

dada pela eq. (4.12) e $\tilde{W}^{\eta=8}$ é a matriz anti-simétrica dada por:

$$\tilde{W}^{\eta=8} = \begin{bmatrix} 0 & w_{1,2}^{\eta=8} & w_{1,3}^{\eta=8} & w_{1,4}^{\eta=8} \\ -w_{1,2}^{\eta=8} & 0 & w_{2,3}^{\eta=8} & w_{2,4}^{\eta=8} \\ -w_{1,3}^{\eta=8} & -w_{2,3}^{\eta=8} & 0 & w_{3,4}^{\eta=8} \\ -w_{1,4}^{\eta=8} & -w_{2,4}^{\eta=8} & -w_{3,4}^{\eta=8} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.29)$$

sendo $w_{i,j}^{\eta=8}$ um polinômio de h com termos de h^9 a h^{16} , ou seja, $w_{i,j}^{\eta=8} = a_9 h^9 + \dots + a_{16} h^{16}$. A análise e os resultados sobre a simpleticidade são semelhantes aos apresentado para os modelos obtidos para o sistema Hénon-Heiles (seção 4.1.9). Se $h < 1$, $w_{i,j}^{\eta=8}$ é mais próximo de 0 do que $w_{i,j}^{\eta=3}$ para um mesmo valor de h , e, conseqüentemente, $\mathscr{W}^{\eta=8}$ é mais próximo de W do que $\mathscr{W}^{\eta=3}$. Assim, o modelo MNC de ordem 8 é mais simplético que o modelo de ordem 3.

4.3 Considerações sobre a simpleticidade do método proposto por Monaco e Normand-Cyrot

Os modelos encontrados para Hénon-Heiles e para Nosé-Hoover chegaram em resultados similares sobre a simpleticidade dos modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot. Modelos de ordem elevada são mais simpléticos do que os de ordem baixa.

Considere o sistema contínuo dado pela eq. (2.1). O modelo discretizado por Monaco e Normand-Cyrot será dado pela eq. (2.67), cuja matriz jacobiana é dada pela eq. (2.70). Aplicando-se o critério de simpleticidade dado pela eq. (2.19) tem-se:

$$\mathscr{W}^{\eta} = (J_k^{\eta})^T W J_k^{\eta} = W + \tilde{W}^{\eta} \quad (4.30)$$

sendo \mathscr{W}^{η} uma matriz anti-simétrica cujos elementos são dados por:

$$(\mathscr{W}^{\eta})_{ij} = \begin{cases} w_{i,j} & , \quad i < j \\ 0 & , \quad i = j \\ -w_{i,j} & , \quad i > j \end{cases} \quad (4.31)$$

$$w_{i,j} = \sum_{r=1}^{n/2} \left[\left(\frac{\partial x_r^{k+1}}{\partial x_i^k} \right) \left(\frac{\partial x_{r+n/2}^{k+1}}{\partial x_j^k} \right) - \left(\frac{\partial x_r^{k+1}}{\partial x_j^k} \right) \left(\frac{\partial x_{r+n/2}^{k+1}}{\partial x_i^k} \right) \right] \quad (4.32)$$

Os elementos da matriz jacobiana são dados pela eq. (2.71). Os elementos $w_{i,j}$ são

multiplicações de elementos da matriz jacobiana, que são polinômios $\mathcal{O}(h^\eta)$, e, portanto, resultam em outros polinômios $\mathcal{O}(h^{2\eta})$. Quando $j = i + \frac{n}{2}$, tem-se uma multiplicação de dois elementos da diagonal da matriz jacobiana, resultando em polinômios $1 + \mathcal{O}(h^{2\eta})$. Logo, \mathcal{W}^η pode ser decomposto pela soma da matriz W mais um resíduo \tilde{W}^η , cujos elementos são polinômios $\mathcal{O}(h^{2\eta})$. Quando $h \rightarrow 0$ ou $h < 1 \wedge \eta \rightarrow \infty$, $\mathcal{W}^\eta \rightarrow W$.

Para o caso dos sistemas Hénon-Heiles e Nosé-Hoover, como $\mathcal{O}(h^{2\eta})$ é um polinômio com termos de $h^{\eta+1}$ a $h^{2\eta}$ e $h < 1$, então $\mathcal{W}^\eta \rightarrow W$ quando $\eta \rightarrow \infty$.

5 *Conclusão*

5.1 **Objetivos principais atingidos com o trabalho**

O trabalho foi iniciado com o estudo de sistemas conservativos, parte da revisão bibliográfica (seção 2.1), no qual foram explorados indicadores de conservação da energia presentes na literatura, tanto para sistemas contínuos, quanto para os discretos, e alguns exemplos de sistemas conservativos discretos.

A solução numérica de sistemas conservativos pode apresentar diversos problemas, que são conhecidos e contornados. Porém, os métodos numéricos usados estão apenas interessados na solução, e não no modelo em si. Métodos numéricos, além da solução, podem também fornecer modelos discretos que podem ser usados em diversas áreas. Não há trabalhos nesta direção na literatura. Partiu-se então para o estudo de métodos de discretização. Dois deles também estão descritos na revisão bibliográfica deste trabalho (seção 2.5), o proposto por Ronald Mickens e o proposto pelos autores Monaco e Normand-Cyrot.

Em seguida, usando-se a metodologia definida no capítulo 3, foram feitas gerados diversos modelos discretizados, usando os métodos de discretização propostos, para os sistemas conservativos estudados. Os resultados, bem como diversas análises e comparações, foram apresentados no capítulo 4.

Resultados da literatura indicam que os modelos discretizados a partir dos métodos propostos por Mickens e Monaco e Normand-Cyrot de baixa ordem não são adequados para representar comportamentos de sistemas contínuos conservativos. Porém, este trabalho mostra que é possível encontrar modelos discretizados dinamicamente válidos que descreveram os sistemas conservativos com suas devidas particularidades (manutenção da energia e simetria) para passos elevados (próximos a frequência de Nyquist), objetivo principal do trabalho, desde que se aumente a ordem da discretização do método proposto por Monaco e Normand-Cyrot.

5.2 Principais contribuições

A discretização feita pelo método de Monaco e Normand-Cyrot demonstrou ser mais robusta do que pelo método proposto por Mickens, mesmo que os termos deste último sejam escolhidos criteriosamente.

Com relação ao passo máximo conseguido na simulação pelo método proposto por Mickens, para o sistema de Hénon-Heiles, (LETELLIER; MENDES; MICKENS, 2007) mostra que é possível atingir $h \approx 0,3s$ sem alterar significativamente a seção de Poincaré com relação a original, e $h \approx 0,85s$ antes de ejetar trajetórias ao infinito e sem exibir mais ilhas na seção de Poincaré. A simetria não é mantida para sistemas conservativos à medida que h aumenta. E para o sistema Sprott-Nosé-Hoover, o método nem consegue produzir discretizações válidas.

Com relação ao passo máximo conseguido na simulação pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot, para o sistema Hénon-Heiles, no melhor caso, o modelo discretizado de ordem 9 conseguiu chegar a $h \approx 0,5s$ sem alterar significativamente a seção de Poincaré com relação a original, e a $h \approx 0,67s$ (frequência de Nyquist) com uma seção de Poincaré deslocada no espaço dos parâmetros. Em $0,67s < h \leq 0,87s$, conseguiu-se reproduzir a seção com perda de detalhes devido ao efeito de borda, que gerou sobreposição em altas frequências. Somente para $h > 0,87s$ se desconfigurou completamente a resposta. Para o sistema Sprott-Nosé-Hoover, o modelo discretizado de ordem 8 conseguiu chegar a $h \approx 0,09s$ (critério de Nyquist) sem alterar significativamente a seção de Poincaré com relação a original. A partir deste valor do passo de discretização, começa-se a ocorrer sobreposição de frequências, mas apenas para $h > 0,23s$ desconfigura-se completamente a resposta. Em todas as simulações, a simetria da seção de Poincaré foi mantida.

Simulações realizadas com diversas estruturas de modelos mostraram que, na discretização pelo método Monaco e Normand-Cyrot, os termos de baixa ordem são necessários para a própria estabilidade do modelo. Por exemplo, na simulação com o sistema de Hénon-Heiles, ao retirar um termo de ordem 2 no modelo discretizado de ordem 3 resulta em um modelo instável. Ainda neste método, os termos de alta ordem não são representativos e podem inclusive ser desprezados para valores do passo de discretização muito pequenos. Mas, à medida que h aumenta, estes termos ganham representatividade na resposta e deixam de ser desprezíveis, sendo cruciais para uma simulação longa. Considere, por exemplo, os modelos discretizados de ordem 3, tanto do sistema Hénon-Heiles, quanto do sistema Sprott-Nosé-Hoover. É possível gerar soluções válidas para valores pequenos

de h . Mas à medida que h aumenta, não mais se consegue ter soluções válidas, sendo necessário termos de mais alta ordem para refinar a resposta. Esta é a razão pela qual se conseguiu atingir a frequência de Nyquist usando o modelo discretizado de ordem mais elevada para ambos os sistemas, o de ordem 9 para Hénon-Heiles e o de ordem 8 para Sprott-Nosé-Hoover.

Em sistemas não-lineares, pode existir o problema bem conhecido da sensibilidade às condições iniciais (STROGATZ, 2000, p. 320). Para a discretização, as condições iniciais são as mesmas, mas a estrutura do modelo é levemente diferente. E os pequenos acréscimos devido aos termos de alta ordem podem fazer muita diferença em longos intervalos de tempo. Instabilidades numéricas surgem quando a estrutura do modelo não consegue reproduzir o sistema original em simulações longas para um determinado h , sendo necessário acrescentar termos de mais alta ordem para melhorar a aproximação.

Verificou-se que o traço da matriz jacobiana exatamente igual à dimensão do sistema não é condição necessária para se obter um modelo com uma estrutura que consiga reproduzir o sistema contínuo original. Pequenas variações podem ocorrer sem que isto afete significativamente a verossimilhança do modelo discretizado. Tal fato pode ser comprovado a partir da análise do modelo discretizado de ordem 9 do sistema Hénon-Heiles, o qual não possui o traço exatamente igual a 4, mas conseguiu reproduzir a seção de Poincaré do sistema contínuo original.

O produto dos autovalores da matriz jacobiana pode ser usado como uma medida para a conservação da energia. Quanto mais próximo de 1,0, mais conservativo é o sistema. Apesar de sua variação absoluta ser muito pequena de um passo de discretização para outro, graficamente é possível detectar o mesmo comportamento da energia.

Os índices de conservação de energia \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 puderam ser usados para analisar a conservação da energia, bem como comparar modelos. Porém, não podem ser utilizados de forma isolada, pois podem dar falsos indicadores sobre a qualidade do modelo. Considere, por exemplo, o modelo discretizado do sistema Hénon-Heiles usando o método proposto por Mickens. Para 0,67, \mathcal{H}_1 é baixíssimo, mostrando que a energia no final da simulação se manteve. Porém, pela análise visual da seção de Poincaré, pode-se notar que a simetria não foi mantida e, logo, este não poderia ser caracterizado como um bom modelo. Os modelos discretizados pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot de ordem mais elevada obtiveram os menores índices \mathcal{H}_2 , mostrando que possuem uma menor variação absoluta da energia a cada instante k para um mesmo período analisado.

O somatório dos expoentes de Lyapunov pode ser usado como um indicador de conser-

vação da energia. Se igual a 0,00, o modelo consegue conservar a energia. A dimensão de Kaplan-York, apesar de não fornecer diretamente esta informação, pode dar uma noção sobre a qualidade do modelo discretizado. A dimensão do modelo discretizado igual a do sistema contínuo original fornece um indício que o modelo está com uma boa estrutura. No caso de sistemas conservativos hamiltonianos, a dimensão de Kaplan-Yorke deve ser igual à dimensão do sistema. E ainda para esta classe de sistemas, a simetria dos expoentes de Lyapunov também pode dar indícios sobre a qualidade do modelo. Todos estes indicadores podem ser utilizados quando não se tem uma equação da energia, como no caso de sistemas conservativos que não possam ser descritos por uma função hamiltoniana.

Como a discretização de ordem elevada pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot apresentou bons resultados para o cálculo dos expoentes de Lyapunov, o processo de discretização mais o cálculo usando o algoritmo discreto apresenta-se como uma outra forma de se calcular os expoentes de Lyapunov de sistema contínuos. Basta encontrar o modelo de ordem elevada e aplicar o algoritmo de cálculo dos expoentes para sistema discretos, que é bem mais simples.

O método proposto por Monaco e Normand-Cyrot corresponde a uma aproximação do fluxo do sistema contínuo. Quanto maior a ordem η , mais termos são adicionados ao modelo e, conseqüentemente, melhora-se a aproximação do modelo com o sistema contínuo. Como a estrutura do modelo consegue gerar um comportamento mais próximo do sistema contínuo, é de se esperar que a energia seja conservada também. Analisando a conservação da energia sob outro ângulo, aumentar a ordem η corresponde a fazer com que o modelo melhore o atendimento ao critério da simplecticidade, deixando o modelo mais simplético e conservando mais a energia. Assim, o método consegue, por meio da ordem de discretização η , fornecer modelos discretizados com diferentes níveis de conservação de energia, sendo a conservação máxima conseguida por $\eta = \infty$.

O método proposto por Monaco e Normand-Cyrot tem a vantagem de ser um método direto, ou seja, basta determinar a ordem desejada para obter as equações de diferenças, não sendo necessário nenhum estudo adicional, como deve ser feito pelo método proposto por Mickens, o qual se deve estudar a ordem correta para o cálculo das derivadas.

A desvantagem do método proposto por Monaco e Normand-Cyrot é que, para se ter um modelo que permita obter uma boa resposta, deve-se ter termos de mais alta ordem, e estes demandam um grande esforço computacional para simulação. Porém, para sistemas conservativos, ainda se torna como uma boa escolha, dado que mantém a simetria da resposta, mesmo para valores elevados de h próximos ao passo dado pelo critério de

Nyquist.

5.3 Trabalhos aceitos e publicados

Esta dissertação resultou, até o momento, na publicação do artigo intitulado “Obtenção de modelos discretizados dinamicamente válidos para o sistema conservativo de Hénon-Heiles” no *Congresso Brasileiro de Automática 2010* (BASTOS; MENDES, 2010b).

Também publicou-se o resumo “Dynamic Valid Models for the Conservative Hénon-Heiles System” sobre o mesmo tema no *Dynamic Days South America 2010: International Conference on Chaos and Nonlinear Dynamics* (BASTOS; MENDES, 2010a). Este último possibilitou ainda o trabalho aceito “Dynamic Valid Models for the Conservative Hénon-Heiles System” a ser publicado no *Journal of Physics: Conference Series* (BASTOS; MENDES, 2011).

5.4 Trabalhos futuros

O tema do presente trabalho foi o resultado da evolução de estudos. Ao se tentar entender um determinado assunto, inúmeras outras dúvidas emergiam. Portanto, algumas propostas de trabalhos futuros podem partir das diversas questões que ficaram sem resposta.

Os modelos discretizados obtidos pelo método proposto por Monaco e Normand-Cyrot geram, além dos pontos-fixos originais do sistema contínuo, diversos outros pontos-fixos espúrios (MENDES; BILLINGS, 2002), cuja quantidade é função da ordem da discretização e o espaçamento é função do passo da discretização. Seria interessante analisar a relação entre estes dois parâmetros e a posição dos pontos-fixos espúrios, tentando verificar se existe semelhança com a análise de frequências. Ou seja, como a amostragem de um sinal contínuo no tempo gera cópias periódicas das frequências do sinal contínuo no domínio da frequência, então os pontos-fixos espúrios poderiam também ser cópias periódicas dos pontos-fixos do sistema contínuo.

A análise dos circuitos da matriz jacobiana de sistemas contínuos podem fornecer uma idéia sobre os pontos-fixos (GOUZE, 1998; THOMAS, 1999; CINQUIN; DEMONGEOT, 2002). Similarmente, poder-se-ia fazer um mapeamento dos circuitos da matriz jacobiana de sistema contínuos para modelos discretos, de forma que se pudesse inferir rapidamente se pelo menos o modelo discretizado conseguiu manter a mesma estrutura dos pontos-fixos.

E, finalmente, um outro trabalho futuro aplicar os modelos discretizados pelos métodos explorados neste trabalho a outras áreas da engenharia, tais como o controle discreto e a validação de modelos a partir de dados reais.

Bibliografia

- AGUIRRE, L. A. *Introdução à Identificação de Sistemas: Técnicas Lineares e Não-Lineares Aplicadas a Sistemas Reais*. 2. ed. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2004.
- AGUIRRE, L. A.; LETELLIER, C.; MAQUET, J. Observability of nonlinear dynamics: Normalized results and a time-series approach. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, AIP, v. 18, n. 1, p. 013123, 2008. Disponível em: <<http://link.aip.org/link/?CHA/18/013123/1>>.
- BARROW, J. D.; LEVIN, J. A test of a test for chaos. *ArXiv Nonlinear Sciences e-prints*, p. 5, Mar 2003. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/nlin/0303070v1>>.
- BASTOS, S. B.; MENDES, E. M. A. Dynamic valid models for the conservative Hénon-Heiles system. In: *DYNAMIC DAYS SOUTH AMERICA 2010: INTERNATIONAL CONFERENCE ON CHAOS AND NONLINEAR DYNAMICS. Resumos*. São José dos Campos-SP: INPE, 2010.
- BASTOS, S. B.; MENDES, E. M. A. Obtenção de modelos discretizados dinamicamente válidos para o sistema conservativo de Hénon-Heiles. In: *XVIII CONGRESSO BRASILEIRO DE AUTOMÁTICA. Anais*. Bonito-MS: Sociedade Brasileira de Automática, 2010. p. 2032–2038.
- BASTOS, S. B.; MENDES, E. M. A. Dynamic valid models for the conservative Hénon-Heiles system. *Journal of Physics: Conference Series*, v. 285, n. 1, 2011. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/1742-6596/285/1/012027>>.
- BESSA, M. *The Lyapunov exponents of conservative continuous-time dynamical systems*. Tese (Doutorado) — Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada, Rio de Janeiro, 2005. Disponível em: <http://www.preprint.impa.br/FullText/Bessa_Mon_Jul_17_16_43_34_BRST_2006/tesebess.ps>.
- BREMEN, H. F. von. *Computation of Lyapunov Characteristic Exponents*. 2010. Apresentação. Disponível em: <www.math.hmc.edu/castro/Bogota-HvB-Junio-2010-All.pdf>.
- BREMEN, H. F. von. Implementation of approach to compute the Lyapunov characteristic exponents for continuous dynamical systems to higher dimensions. *Journal of the Franklin Institute*, v. 347, n. 1, p. 315–338, 2010.
- BROWN, R.; BRYANT, P.; ABARBANEL, H. D. I. Computing the Lyapunov spectrum of a dynamical system from an observed time series. *Physical Review A*, v. 43, n. 6, p. 2787–2806, 1991. Disponível em: <http://inls.ucsd.edu/~pbryant/Brown1991_ComputingLyapunov.pdf>.

- BUTCHER, J. C. Coefficients for the study of Runge-Kutta integration processes. *Journal of the Australian Mathematical Society*, v. 3, p. 185–201, 1963. Disponível em: <http://journals.cambridge.org/download.php?file=%2FJAZ%2FJAZ3_02%2FS1446788700027932a.pdf&code=235ad438674f68ef3d961c531b3262e2>.
- BUTCHER, J. C. Implicit runge-kutta processes. *Mathematics of Computation*, v. 18, n. 85, p. 50–64, Jan 1964. Disponível em: <<http://www.ams.org/journals/mcom/1964-18-085/S0025-5718-1964-0159424-9/S0025-5718-1964-0159424-9.pdf>>.
- CHANNEL, P. J.; SCOVEL, C. Symplectic integration of hamiltonian systems. *Nonlinearity*, v. 3, p. 231–259, 1990. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/0951-7715/3/2/001/>>.
- CHIAVENATO, I. *Introdução à Teoria Geral da Administração*. 7. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2003.
- CINQUIN, O.; DEMONGEOT, J. *Roles of Positive and Negative Feedback in Biological Systems*. 2002.
- DETTMANN, C. P.; MORRIS, G. P. Hamiltonian reformulation and pairing of Lyapunov exponents for Nosé-Hoover dynamics. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 55, n. 3, p. 3693–3696, Mar 1997.
- DIECI, L.; RUSSELL, R. D.; VLECK, E. S. V. On the computation of Lyapunov exponents for continuous dynamical systems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Society for Industrial and Applied Mathematics, v. 34, n. 1, p. 402–423, Feb 1997. ISSN 00361429. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2952049>>.
- DIECI, L.; VLECK, E. S. V. Computation of a few Lyapunov exponents for continuous and discrete dynamical systems. *Appl. Numer. Math.*, v. 17, p. 275–291, 1995. Disponível em: <<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.53.6177>>.
- EGGER, J. Volume conservation in phase space: A fresh look at numerical integration schemes. *Monthly Weather Review*, v. 124, n. 9, p. 1955–1964, 1996. Disponível em: <<http://journals.ametsoc.org/doi/abs/10.1175/1520-0493%281996%29124%3C1955%3AVCIPSA%3E2.0.CO%3B2>>.
- FIEDLER-FERRARA, N.; PRADO, C. P. C. do. *Caos: Uma Introdução*. 1. ed. São Paulo: Editora Edgard Blucher Ltda, 1994.
- GOTTWALD, G. A.; MELBOURNE, I. A new test for chaos in deterministic systems. In: *Royal Society of London*. The Royal Society, 2003. v. 460, p. 603–611. Disponível em: <<http://epubs.surrey.ac.uk/1514/1/fulltext.pdf>>.
- GOUZE, J.-L. Positive and negative circuits in dynamical systems. *J. Biol. SVs*, v. 6, p. 11–15, 1998.
- GROND, F.; DIEBNER, H. H. Local Lyapunov exponents for dissipative continuous systems. *Chaos, Solitons and Fractals*, v. 23, p. 1809–1817, 2005. Disponível em: <<http://www.diebner.de/texts/GrondEtAl2.pdf>>.
- HAIRER, E.; HAIRER, M. *GniCodes: Matlab Programs for Geometric Numerical Integration*. 2002. Disponível em: <<http://www.unige.ch/~hairer/preprints/gnicodes.ps.gz>>.

HAIRER, E.; LUBICH, C.; WANNER, G. *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*. 2. ed. Netherlands: Springer, 2006.

HALE, J.; KOÇAK, H. *Dynamics and Bifurcations*. 1. ed. USA: Springer-Verlag, 1991.

HÉNON, M.; HEILES, C. The applicability of the third integral of motion: some numerical experiments. *Astron*, v. 69, p. 73–79, 1964.

HOOVER, G. Nosé-hoover nonequilibrium dynamics and statistical mechanics. 2006. Disponível em: <<http://www.williamhoover.info/nosetalk.pdf>>.

HOOVER, W. G. *Computational Statistical Mechanics*. Elsevier, 1991. Disponível em: <<http://williamhoover.info/book.pdf>>.

HOOVER, W. G. Remark on “simple chaotic flows”. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 51, n. 1, p. 759–760, Jan 1995. Disponível em: <<http://williamhoover.info/Scans1990s/1995-2.pdf>>.

LETELLIER, C.; AGUIRRE, L. A.; MAQUET, J. Relation between observability and differential embeddings for nonlinear dynamics. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 71, n. 6, p. 066213, Jun 2005.

LETELLIER, C.; MENDES, E. M. A. M. Displacement in the parameter space versus spurious solution of discretization with large time step. *Journal of Physics A*, v. 37, n. 4, p. 1203–1218, 2004.

LETELLIER, C.; MENDES, E. M. A. M. Robust discretizations against increase of the time step for the Lorenz system. *Chaos*, v. 15, 2005.

LETELLIER, C.; MENDES, E. M. A. M.; MICKENS, R. E. Nonstandard discretization schemes applied to the conservative Hénon-Heiles system. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, v. 17, n. 3, p. 891–902, 2007.

LIBERT, A.-S.; HUBAUX, C.; CARLETTI, T. Symplectic integration of deviation vectors and chaos determination. Application to the Hénon-Heiles model and to the restricted three-body problem. *ArXiv e-prints*, May 2010. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1005.5611>>.

LIMA, P. C. de. *Apostila de Equações Diferenciais A*. 2004. Disponível em: <http://www.mat.ufmg.br/~lima/apostilas/apostila_eda.pdf>.

MARKIEWICZ, D. W. *Survey On Symplectic Integrators*. 1999. Disponível em: <<http://math.berkeley.edu/~alanw/242papers99/markiewicz.pdf>>.

MCHLACHLAN, R. I. A new implementation of symplectic Runge-Kutta methods. *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 29, n. 4, p. 1637–1649, Jun 2007. Disponível em: <<http://www.massey.ac.nz/~rmclachl/sisc2007.pdf>>.

MENDES, E. M. A. M. *Comunicação verbal*. 2011.

MENDES, E. M. A.; BILLINGS, S. A. A note on discretization of nonlinear differential equations. *Chaos*, v. 12, n. 1, p. 66–71, 2002.

- MICKENS, R. E. [Carta] 25 jan. 2003, EUA [para] BILLINGS, S. A.; MENDES, E. M. A. M., Brasil. 5f. Idéias sobre a discretização usando o método proposto por Mickens.
- MICKENS, R. E. [Carta] 23 ago. 2004, EUA [para] LETELLIER, C., França. 5f. Idéias sobre a discretização das equações diferenciais do sistema Hénon-Heiles.
- MICKENS, R. E. Nonstandard finite difference schemes for differential equations. *Journal of Difference Equations and Applications*, v. 8, p. 823–847, 2002.
- MICKENS, R. E. A numerical integration technique for conservative oscillators combining nonstandard finite-difference methods with a hamilton's principle. *Journal of Sound and Vibration*, v. 285, n. 1–2, p. 477–482, 2005.
- MIKKOLA, S.; PALMER, P. Simple derivation of symplectic integrators with first order correctors. *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, Kluwer Academic Publishers, v. 77, p. 305–317, Aug 2000. Disponível em: <<http://www.springerlink.com/content/p1p4967wx4018j17/>>.
- MONACO, S.; NORMAND-CYROT, D. A combinatorial approach to the nonlinear sampling problem. In: THOMA, M.; WYMER, A. (Ed.). *Lecture Notes in Control and Information Sciences*. New York: Springer-Verlag, 1990. v. 144, p. 788–797.
- MONACO, S.; NORMAND-CYROT, D.; TIEFENSEE, F. Nonlinear port controlled hamiltonian systems under sampling. *Joint 48th IEEE Conference on Decision and Control and 28th Chinese Control Conference*, p. 1782–1787, Dec 2009.
- MONTEIRO, L. H. A. *Sistemas Dinâmicos*. 2. ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2006.
- OPPENHEIM, A. V.; WILLSKY, A. S. *Signals and Systems*. 2. ed. [S.l.]: Prentice Hall, 1998.
- PERKO, L. *Differential Equations and Dynamical Systems*. 2. ed. USA: Springer-Verlag, 1996.
- POSCH, H. A.; HOOVER, W. G.; VESELY, F. J. Canonical dynamics of the nosé oscillator: Stability, order, and chaos. *Physica Review A*, v. 33, n. 6, p. 4253–4265, 1986. Disponível em: <<http://williamhoover.info/Scans1980s/1986-4.pdf>>.
- PRESS, W. H. et al. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. 3. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007. ISBN 0521880688.
- PUTZER, E. J. Avoiding the jordan canonical form in the discussion of linear systems with constant coefficients. *The American Mathematical Monthly*, Mathematical Association of America, v. 73, n. 1, p. 2–7, Jan 1966. ISSN 00029890. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2313914>>.
- RAMASWAMY, R. Symmetry-breaking in local Lyapunov exponents. *European Physical Journal B*, v. 29, p. 339–343, Sep 2002.
- ROBINSON, R. C. *An Introduction to Dynamical Systems: Continuous and Discrete*. 1. ed. USA: Pearson Prentice Hall, 2004.

- RÜHLE, V. Berendsen and nose-hoover thermostats. *Am. J. Phys.*, v. 65, n. 6, p. 537–543, 2007. Disponível em: <http://www.mpi-mainz.mpg.de/~andrienk/journal_club/thermostats.pdf>.
- SPROTT, J. C. Some simple chaotic flows. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 50, n. 2, p. R647–R650, Aug 1994.
- SPROTT, J. C. Some simple chaotic jerk functions. *Am. J. Phys.*, v. 65, n. 6, p. 537–543, 1997. Disponível em: <<http://sprott.physics.wisc.edu/pubs/paper229.pdf>>.
- SPROTT, J. C. *Elegant Chaos: Algebraically Simple Chaotic Flows*. 1. ed. USA: World Scientific, 2010.
- SPROTT, J. C.; LINZ, S. J. Algebraically simple chaotic flows. *International Journal of Chaos Theory and Application*, v. 5, n. 2, p. 3–22, 2000. Disponível em: <<http://plasma.physics.wisc.edu/uploadedfiles/journal/Sprott126.pdf>>.
- STROGATZ, S. H. *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering*. 1. ed. USA: Westview Press, 2000.
- SVORONOS, S.; PAPAGEORGIOU, D.; TSILIGIANNIS, C. Discretization of nonlinear control systems via the Carleman linearization. *Chemical Engineering Science*, v. 49, n. 19, p. 3263–3267, 1994. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TFK-444PGSH-SP/2/c9d35ddefbfcd82941632cb0ac7d4e>>.
- THOMAS, R. Deterministic chaos seen in terms of feedback circuits: analysis, synthesis, “labyrinth chaos”. *International Journal of Bifurcation and Chaos (IJBC)*, World Scientific Publishing Company, v. 9, n. 10, p. 1889–1905, 1999.
- TOBOCHNIK, J.; GOULD, H. *Quantifying Chaos*. 1989. Disponível em: <<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.28.1760>>.
- UDWADIA, F. E.; BREMEN, H. F. von. Computation of Lyapunov characteristic exponents for continuous dynamical systems. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, v. 53, n. 1, p. 123–146, 2001. Disponível em: <http://ame-www.usc.edu/bio/udwadia/papers/Computation_of_Lyapunov_characteristic_exponents.pdf>.
- UDWADIA, F. E.; BREMEN, H. F. von. An efficient and stable approach for computation of lyapunov characteristic exponents of continuous dynamical systems. *Applied Mathematics and Computation*, v. 121, p. 219–259, 2001. Disponível em: <http://ame-www.usc.edu/bio/udwadia/papers/An_efficient_and_stable_approach_for_computation.pdf>.
- UDWADIA, F. E.; BREMEN, H. F. von; PROSKUROWSKI, W. An efficient QR based method for the computation of lyapunov exponents. *Physica D*, v. 101, p. 1–16, 1997. Disponível em: <http://ame-www.usc.edu/bio/udwadia/papers/An_efficient_QR.pdf>.
- VALLEJO, J. C.; AGUIRRE, J.; SANJUÁN, M. A. F. Characterization of the local instability in the Hénon-Heiles hamiltonian. *Physics Letters A*, v. 311, n. 1, p. 26–38, 2003. ISSN 0375-9601. Disponível em: <http://www.escet.urjc.es/~fisica/investigacion/publicaciones/Papers/2003/aguirre_plaexpo.pdf>.

WIKIPEDIA. *Poincaré map*. Jul 2010. Disponível em:
<http://en.wikipedia.org/wiki/Poincar%C3%A9_map>.

WOLF, A.; SWIFT, J. B.; SWINNEY, H. L.; VASTANO, J. A. Determining lyapunov exponents from a time series. *Physica D*, v. 16, p. 285–317, 1985. Disponível em:
<<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.152.3162&rep=rep1&type=pdf>>.

ZHANG, Z. et al. Comparative study of matrix exponential and taylor series discretization methods for nonlinear odes. *Simulation Modelling Practice and Theory*, v. 17, n. 2, p. 471–484, 2009. ISSN 1569-190X. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/B6X3C-4TRK0RJ-1/2/aeaaf0730c41334e814cbabacc09970e>>.

ANEXO A -- Implementação em Matlab do método de integração numérica simplético

O código-fonte apresentado a seguir implementa o método de integração numérica Runge-Kutta com coeficientes dados por Gauss-Legendre, que é um método simplético. Francisco Beron-Vera, autor deste código, disponibilizou a implementação em:

<http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/7686>

```
function zout = gls(X, DX, tspan, zin, s, tout, tol, maxiter, varargin)
%GLS S-stage Gauss-Legendre solver, symplectic method.
% Y = GLS(ODEFUN,JACOBIAN,TSPAN,Y0,S) integrates the system of ordinary
% differential equations  $y' = f(t,y)$  using a fully implicit S-stage
% Gauss-Legendre Runge-Kutta method by stepping from T0 to T1 to T2, etc.
% Function ODEFUN(T,Y) must return  $f(t,y)$  in an N-dimensional column
% vector. The vector Y0 is the initial conditions at T0. Each row in the
% solution array Y corresponds to a time specified in TSPAN. Function
% JACOBIAN(T,Y) must return the Jacobian matrix of  $f(t,y)$  which is needed
% to perform Newton iterations for solving a system of  $2*N*S$  nonlinear
% algebraic equations each time step.
%
% Y = GLS(ODEFUN,JACOBIAN,TSPAN,Y0,S,TOUT) returns the solution at times
% specified by TOUT. This is meant either for stroboscopic sampling at
% integer multiples of TS or to return the solution at the final time
% specified in TSPAN. In the former case TSPAN = 0:TS/M:N*TS and
% TOUT = TS:TS:N*TS, whereas in the latter TOUT = TSPAN(END). Default
% setting is TOUT = TSPAN.
%
% Y = GLS(ODEFUN,JACOBIAN,TSPAN,Y0,S,TOUT,TOL,MAXITER) allows to set the
```

```

% error tolerance TOL for the relative increment of the solution of the
% algebraic system, the maximum number of iterations MAXITER to be
% performed. Default settings are TOL = 1e-6 and MAXITER = 15.
%
% Y = GLS(ODEFUN,JACOBIAN,TSPAN,Y0,S,TOL,MAXITER,TOUT,VARARGIN) passes the
% additional parameters P1, P2, ... to ODEFUN and JACOBIAN as ODEFUN(T,Y,
% P1,P2,...) and JACOBIAN(T,Y,P1,P2,...).
%
% For general canonical Hamiltonian systems the S-stage Gauss-Legendre
% methods are symplectic, have optimal order (2*S), and are also A-stable.
% See details in McLachlan & Atela (1992), Nonlin. 5, 541.
%
% Example: Solve  $x'' + w^2 \sin(x) = 0$ ,  $x(0) = 2$ ,  $x'(0) = 0$ ,  $w = 1$ , using a
% 6th-order method with tolerance 1e-3 and 10 maximum Newton
% iterations per time step, and plot solution in phase space.
%
%     y=glS(@(t,y,w) [y(2);-w^2*sin(y(1))],...
%           @(t,y,w) [0 1;-w^2*cos(y(1)) 0],...
%           [0:.025:4*pi],[2;0],...
%           3,[0:.025:4*pi],1e-3,10,...
%           1);
%     plot(y(:,1),y(:,2))
%
% See also SEEQ, SEEP, SEIQ, SEIP.
%
% Francisco J. Beron-Vera, 27-Mar-2005
% $Revision: 1.2 $ $Date: 31-Mar-2005 13:52:34 $
%
% Set default parameters.
if nargin < 6
    tout = tspan;
    tol = 1e-6;
    maxiter=15;
elseif nargin < 7
    tol = 1e-6;
    maxiter=15;
elseif nargin < 8
    maxiter=15;
end

% Set dimensions.
Nz = length(zin);
Ntout = length(tout);

```

```

Ntspan = length(tspan);
if Ntspan == Ntout
    nsample = 1;
    nmax = Ntout;
elseif (Ntspan > Ntout) && (Ntout > 1)
    nsample = (Ntspan-1)/Ntout;
    nmax = nsample*Ntout+1;
else
    nsample = Ntspan-1;
    nmax = Ntspan;
end

% Fill-in solution array with zeros.
zout = zeros(Ntout,Nz);
if Ntspan == Ntout
    zout(1,:) = zin';
    nout = 2;
else
    nout = 1;
end

% Load coefficients for s-stage method.
[a b c] = abc(s);

% Main loop.
hspan = diff(tspan);
z = zin;
for n = 2:nmax
    t = tspan(n-1);
    if ~mod(n,1000)
        disp(['t = ' num2str(t) ' of ' num2str(tspan(end))])
    end
    h = hspan(n-1);
    g = newton(@(g) F(g, X, t, h, z, s, a, c, Nz, varargin{:}), ...
        @(g) DF(g, DX, t, h, s, a, c, Nz, varargin{:}), ...
        repmat(z,s,1), tol, maxiter);
    dz = zeros(Nz,1);
    for m = 1:s
        M = (m-1)*Nz+1:m*Nz;
        dz = dz + h*b(m)*feval(X, t+c(m)*h, g(M), varargin{:});
    end
    z = z + dz;
    if ~mod(n-1,nsample)

```

```

        zout(nout,:) = z';
        nout = nout + 1;
    end
end

%-----
function out = F(g, X, t, h, z, s, a, c, Nz, varargin)
% F returns algebraic system F(g) = 0.
out = zeros(Nz*s,1);
for j = 1:s
    J = (j-1)*Nz+1:j*Nz;
    dg = zeros(Nz,1);
    for k = 1:s
        K = (k-1)*Nz+1:k*Nz;
        dg = dg + h*a(j,k)*feval(X, t+c(k)*h, g(K), varargin{:});
    end
    out(J) = g(J) - z - dg;
end
%-----
function out = DF(g, DX, t, h, s, a, c, Nz, varargin)
% DF returns Jacobian matrix for F(g) = 0.
out = zeros(Nz*s);
for j = 1:s
    J = (j-1)*Nz+1:j*Nz;
    for k = 1:s
        K = (k-1)*Nz+1:k*Nz;
        out(J,K) = h*a(j,k)*feval(DX, t+c(k)*h, g(K), varargin{:});
    end
end
end
out = eye(Nz*s) - out;
%-----
function [a, b, c] = abc(s)
% ABC returns coefficients for S-stage Gauss-Legendre methods. (From RKGL,
% DiffMan package v.2 by K. Engo, A. Marthinsen & H. Munthe-Kaas.)
c = roots(slegendre(s));
c = sort(c);
V = vander(c);
V = V(:,s:-1:1);
J = diag(1./(1:s));
invV = inv(V);
a = diag(c)*V*J*invV;
b = (ones(1,s)*J*invV)';
%-----

```



```

function Pn = slegendre(n)
% SLEGENDRE returns shifted Nth-order Legendre polynomials normalized in
% the interval [0 1]. (From SLEGENDRE, DiffMan package v.2 by K. Engo,
% A. Marthinsen & H. Munthe-Kaas.)
Pnm1 = [];
Pn = 1;
for m = 0:n-1
    A1n = m + 1;
    A2n = - 2*m - 1;
    A3n = 4*m + 2;
    A4n = - m;
    PnP1 = A2n*[0 Pn] + A3n*[Pn 0] + A4n*[0 0 Pnm1];
    PnP1 = PnP1/A1n;
    Pnm1 = Pn;
    Pn = PnP1;
end
%-----
function xout = newton(sysfun, jacfun, xin, tol, maxiter, varargin)
% NEWTON solves nonlinear algebraic systems.
j = 0;
dx = tol + 1;
while (dx > tol) && (j <= maxiter)
    j = j + 1;
    F = feval(sysfun, xin, varargin{:});
    J = feval(jacfun, xin, varargin{:});
    xout = xin - J\F;
    dx = norm(xout-xin);
    xin = xout;
end

```