



Universidade Federal do Rio de Janeiro
Centro de Ciências Matemáticas e da Natureza
Observatório do Valongo
Departamento de Astronomia

**Elipsóides Interagentes: Um modelo para a
fragmentação de um asteróide reacumulado**

Projeto de final de curso para a obtenção do título de astrônomo

Aluno

Paulo Fernando Penteado

Orientadores

Dra. Daniela Lazzaro - Observatório Nacional

Dr. Takeshi Kodama - Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

Quem nos ensinou a reconhecer as analogias verdadeiras e profundas, aquelas que os olhos não vêem e que a razão adivinha?

O espírito matemático, que desdenha a matéria, para só se ater à forma pura. Foi ele que nos ensinou a chamar pelo mesmo nome seres que só diferem pela matéria, a chamar pelo mesmo nome, por exemplo, a multiplicação dos quatérnions e a dos números inteiros.

Se os quatérnions, dos quais acabo de falar, não tivessem sido prontamente utilizados pelos físicos ingleses, sem dúvida muitas pessoas só veriam neles um devaneio ocioso; contudo, ensinando-nos a aproximar o que as aparências separam, eles já nos teriam tornado mais aptos a penetrar os segredos da natureza.

Henri Poincaré

O valor da ciência, 1905

(Trad. Maria Heleno Franco Martins, 1995, Contraponto Editora, p.92)

The following table shows the results of the experiment. The first column shows the number of trials, the second column shows the number of correct responses, and the third column shows the percentage of correct responses. The data shows that the number of correct responses increases as the number of trials increases, and that the percentage of correct responses remains relatively constant.

Number of Trials	Number of Correct Responses	Percentage of Correct Responses
10	7	70%
20	14	70%
30	21	70%
40	28	70%
50	35	70%

The results of the experiment show that the number of correct responses increases as the number of trials increases, and that the percentage of correct responses remains relatively constant. This suggests that the subject is learning the task and performing it consistently.

Agradecimentos

À minha família, por ter possibilitado que eu chegasse até aqui.

Aos meus amigos, em especial Daniel Epitácio Pereira, Rodolfo Smiljanic, Graziela Keller, Ana Beatriz de Mello e Leandro Guedes, pela companhia e ajuda ao longo dos últimos anos.

Aos meus orientadores, Daniela Lazzaro e Takeshi Kodama, pela orientação e pela paciência ao longo deste trabalho.

Aos meus vários professores, em especial, a Lília Arany Prado, Encarnaciòn Gonzalez, Sueli Guillens e Adolfo Snajdauf do Observatório do Valongo, pelo que ensinaram e orientaram.

Aos professores Carlos Farina e Marcos Venícius Cougo-Pinto, do Instituto de Física da UFRJ, pelos seus excelentes cursos.

Aos que me ajudaram a começar a graduação, do Conselho Estadual de Educação de São Paulo, da Escola Synésio Martins e da UFRJ, em especial a Ana Maria Ribeiro e Ricardo Medronho.

The first part of the book is devoted to a general introduction to the theory of the firm. This includes a discussion of the basic concepts of production, cost, and profit. The second part of the book is devoted to a detailed analysis of the theory of the firm. This includes a discussion of the theory of the firm in a dynamic context, the theory of the firm in a market context, and the theory of the firm in a general equilibrium context. The third part of the book is devoted to a detailed analysis of the theory of the firm in a dynamic context. This includes a discussion of the theory of the firm in a dynamic context, the theory of the firm in a dynamic context, and the theory of the firm in a dynamic context.

Conteúdo

1 Os Asteróides e suas Características: Introdução	1
1.1 Asteróides	1
1.2 Propriedades Dinâmicas dos Asteróides	3
1.3 Propriedades Rotacionais e Físicas dos Asteróides	9
1.4 Formação e Evolução do Cinturão de Asteróides	21
2 Inventando um asteróide: Definição do modelo	33
2.1 Modelando um asteróide reacumulado	33
2.2 Desenvolvimento do Potencial de Contato	39
2.3 Desenvolvimento do lagrangeano do sistema	45
2.3.1 Rotação	45
2.3.2 Quatérnions	49
2.4 Desenvolvimento das equações de movimento	63
2.4.1 Desenvolvimento das derivadas do lagrangeano	70
3 Fazendo o Asteróide: Implementação Computacional do Modelo	77
4 Testando o Asteróide: Análise do Modelo	87
4.1 Translação sem rotação e sem contato	89
4.2 Translação sem rotação com contato	92
4.3 Rotação sem translação e sem contato	96
4.4 Colisão com rotação	97
5 Conclusões e Perspectivas Futuras	101
Referências	103

Conteúdo

1. O Adversário e sua Defesa 11

1.1. Introdução 11

1.2. História da Defesa 12

1.3. O Adversário e sua Defesa 13

1.4. O Adversário e sua Defesa 14

1.5. O Adversário e sua Defesa 15

1.6. O Adversário e sua Defesa 16

1.7. O Adversário e sua Defesa 17

1.8. O Adversário e sua Defesa 18

1.9. O Adversário e sua Defesa 19

1.10. O Adversário e sua Defesa 20

2. O Adversário e sua Defesa 21

2.1. O Adversário e sua Defesa 22

2.2. O Adversário e sua Defesa 23

2.3. O Adversário e sua Defesa 24

2.4. O Adversário e sua Defesa 25

2.5. O Adversário e sua Defesa 26

2.6. O Adversário e sua Defesa 27

2.7. O Adversário e sua Defesa 28

2.8. O Adversário e sua Defesa 29

2.9. O Adversário e sua Defesa 30

2.10. O Adversário e sua Defesa 31

3. O Adversário e sua Defesa 32

3.1. O Adversário e sua Defesa 33

3.2. O Adversário e sua Defesa 34

3.3. O Adversário e sua Defesa 35

3.4. O Adversário e sua Defesa 36

3.5. O Adversário e sua Defesa 37

3.6. O Adversário e sua Defesa 38

3.7. O Adversário e sua Defesa 39

3.8. O Adversário e sua Defesa 40

3.9. O Adversário e sua Defesa 41

3.10. O Adversário e sua Defesa 42

4. O Adversário e sua Defesa 43

4.1. O Adversário e sua Defesa 44

4.2. O Adversário e sua Defesa 45

4.3. O Adversário e sua Defesa 46

4.4. O Adversário e sua Defesa 47

4.5. O Adversário e sua Defesa 48

4.6. O Adversário e sua Defesa 49

4.7. O Adversário e sua Defesa 50

4.8. O Adversário e sua Defesa 51

4.9. O Adversário e sua Defesa 52

4.10. O Adversário e sua Defesa 53

5. O Adversário e sua Defesa 54

5.1. O Adversário e sua Defesa 55

5.2. O Adversário e sua Defesa 56

5.3. O Adversário e sua Defesa 57

5.4. O Adversário e sua Defesa 58

5.5. O Adversário e sua Defesa 59

5.6. O Adversário e sua Defesa 60

5.7. O Adversário e sua Defesa 61

5.8. O Adversário e sua Defesa 62

5.9. O Adversário e sua Defesa 63

5.10. O Adversário e sua Defesa 64

Resumo

Asteróides reacumulados são corpos formados pela reaglomeração de fragmentos gerados por uma colisão. Atualmente no Cinturão de Asteróides há uma alta dispersão das órbitas, que leva a altas velocidades relativas entre os asteróides. Este regime de alta dispersão de velocidades faz com que a maior parte dos asteróides tenha uma alta probabilidade de ter sofrido uma colisão capaz de levar a uma fragmentação significativa. Desta forma, as colisões constituem um processo importante para a evolução física e dinâmica dos asteróides do Cinturão.

A explicação padrão para a formação das famílias de asteróides é que elas representem os fragmentos gerados em uma colisão no passado. Mas ainda não há modelos que expliquem de forma mais precisa a formação das famílias e as propriedades rotacionais observadas, o que se deve principalmente à complexidade inerente ao estudo de rotações e à falta de compreensão dos processos de fragmentação e colisão.

Desenvolvemos um novo modelo para fragmentação colisional, baseado em integrações numéricas das equações de movimento de Euler-Lagrange para um sistema de asteróides reacumulados. Cada fragmento é representado por um elipsóide, com uma distribuição de densidade gaussiana, e que interage com os outros apenas pela suas forças gravitacionais e de contato. Apresentamos o desenvolvimento do modelo e os testes realizados, que têm indicado o seu funcionamento adequado, de forma que a sua aplicação pode ser iniciada.

Palavras-chave: asteróides reacumulados, famílias de asteróides, colisões, fragmentação, quatérnions.

Resumo

Este trabalho tem como objetivo principal investigar a influência da cultura organizacional na percepção de justiça organizacional. Para isso, foram analisados dados de uma pesquisa realizada em uma empresa de tecnologia da informação. Os resultados indicam que a cultura organizacional exerce um impacto significativo na percepção de justiça organizacional, especialmente em relação à justiça distributiva e à justiça procedimental. Além disso, foi observado que a percepção de justiça organizacional está diretamente relacionada à satisfação dos colaboradores e à intenção de permanecer na organização. Portanto, a cultura organizacional pode ser utilizada como uma ferramenta estratégica para promover a justiça organizacional e, consequentemente, melhorar o desempenho organizacional.

Abstract

Rubble-pile asteroids are formed by the reaccumulation of fragments generated by an asteroid collision. Currently in the Asteroid Belt there is a high orbital dispersion, that results in high relative speeds between the asteroids. This high velocity dispersion gives to most asteroids a high probability of past collisions capable of causing a significative fragmentation. Therefore, collisions constitute an important process for the physical and dynamical evolution of Asteroid Belt bodies.

The standard model for asteroid families formation is that these families are constituted by the fragments created by a past collision. The problem is the absence of models capable of more precise descriptions of the family formation process and the observed rotational properties of the asteroids, what is a consequence of the great complexity inherit to the rotation studies and the lack of knowledge concerning fragmentation and collision processes.

We developed a new model for collisional fragmentation, based in numerically integrating the Euler-Lagrange equations of motion for a system of rubble-pile asteroids. Each fragment is represented by an ellipsoid with a gaussian density distribution. The fragments interact only by their mutual gravity and contact forces. We present here the development of the model and the tests performed. These tests have indicated that the model works properly, meaning that it can be applied to study the collisional evolution of asteroids.

Keywords: rubble-pile asteroids, asteroid families, collision, fragmentation, quaternions.

Abstract

Abstract (mirrored text from the reverse side of the page, appearing as bleed-through). The text is largely illegible due to the low contrast and bleed-through nature of the scan. It appears to be a summary of a document, possibly related to the 'CONTEÚDO' section mentioned in the header.

Capítulo 1

Os Asteróides e suas Características: Introdução

1.1 Asteróides

As idéias de origem pitagórica de encontrar regularidades matemáticas na natureza, que eram muito fortes no século XVIII, fizeram com que fosse conveniente a descoberta, em 1766, da hoje chamada Regra de Titius-Bode, que aproxima os semi-eixos maiores dos planetas, dada por $a' = (0.4 + 0.3 \cdot 2^n)UA$, com $n = -\infty$ para Mercúrio, 0 para Vênus, 1 para a Terra, 2 para Marte, 4 para Júpiter e 5 para Saturno. As diferenças para os valores observados eram consideradas na época como atribuíveis a erros observacionais. Segundo esta regra, o próximo planeta, se existisse, deveria ter $n = 6$, estando portanto a $a' = 19.6UA$. Em 1781, William Herschel descobriu Urano, cuja órbita tem semi-eixo maior de $a = 19.19UA$, o que se mostrou na época como uma importante confirmação de que a Regra de Titius-Bode teria um significado importante, e fortaleceu a idéia de que faltava um planeta, que teria $n = 3$ e $a' = 2.8UA$. Em 1800, um grupo de astrônomos alemães começou uma procura sistemática por este planeta. Mas foi por acaso que em 1801 o astrônomo italiano Giuseppe Piazzi encontrou um corpo em uma órbita com $a = 2.8UA$ (calculada com

2CAPÍTULO 1. OS ASTERÓIDES E SUAS CARACTERÍSTICAS: INTRODUÇÃO

o método desenvolvido ainda naquele ano por Gauss). Por sua imagem ser pontual como a de uma estrela, ele foi mais tarde classificado como um *asteróide*. Este recebeu o nome individual de Ceres, em homenagem à deusa protetora da Sicília, e foi o primeiro de uma série de outros corpos semelhantes a serem descobertos com órbitas entre Marte e Júpiter, constituindo o que hoje conhecemos como Cinturão de Asteróides.

Cada asteróide com órbita bem determinada recebe um número sequencial, podendo posteriormente receber um nome, caso no qual o asteróide é designado por seu número seguido de seu nome, como em 1 Ceres, 2 Pallas, 3 Juno, 4 Vesta, 5 Astraea. Inicialmente, quando poucos asteróides eram conhecidos, eles recebiam nome de deusas da mitologia clássica; posteriormente, quando o número se tornou demasiadamente grande, os nomes se tornaram mais diversificados, incluindo nomes de pesquisadores e de lugares na Terra, e hoje a maioria não tem um nome próprio. O número de asteróides numerados tem aumentado rapidamente: em 1989 eram cerca de 5000; em 1998 eram 9500; em 2001 eram 22000 e em 27 de abril de 2002, 39462 numerados e 138480 não numerados (Bowell, 2002). A catalogação, numeração e nomeação dos asteróides é feita atualmente pelo *Minor Planet Center*, organização da divisão 20 da União Astronômica Internacional.

Além do Cinturão de Asteróides compreendido entre Marte e Júpiter, aproximadamente entre 2.1 e 3.3 UA, onde se concentra a grande maioria dos asteróides conhecidos, há outros grupos: com órbitas próximas à da Terra (NEA ou NEO - *Near-Earth Asteroids/Objects*) e nos pontos lagrangeanos L_4 e L_5 do sistema Sol-Júpiter (os dois pontos de equilíbrio estável para um terceiro corpo, de massa desprezível, se manter no sistema Sol-Júpiter), onde há duas outras concentrações de asteróides, denominadas coletivamente de Troianos. Estes asteróides tradicionalmente recebem nomes de personagens da guerra de Tróia, das narrações de Homero na *Ilíada* e na *Odisséia*: os asteróides do ponto L_4 (o que fica à frente de Júpiter) recebem nomes de personagens gregos, e os do ponto L_5 recebem nomes de personagens troianos, havendo ainda um grego dentre os troianos e um troiano dentre os

gregos (dois espiões).

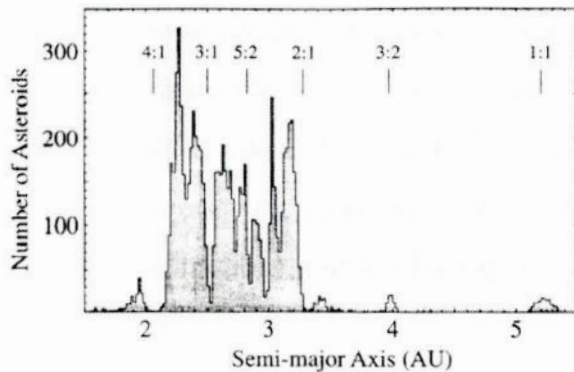
Em órbitas mais externas há outros grupos de objetos conhecidos, embora em muitos casos não tenham sido classificados como asteróides ou cometas: os que cruzam as órbitas dos planetas gigantes (Centauros) e os que ficam além da órbita de Netuno (Transnetunianos). A uma distância de até 300UA, estes objetos formam o cinturão de Kuiper, com poucos objetos observados até hoje e que poderia ser uma fonte de cometas de curto período. Acredita-se ainda haver uma nuvem esférica de cometas e asteróides a uma distância muito maior, a cerca de 60 000 UA, a nuvem de Oort, que seria a origem dos cometas não periódicos e de longo período, uma vez que estes têm uma distribuição uniforme de inclinações e os periódicos têm semi-eixos maiores nesta faixa de valores.

1.2 Propriedades Dinâmicas dos Asteróides

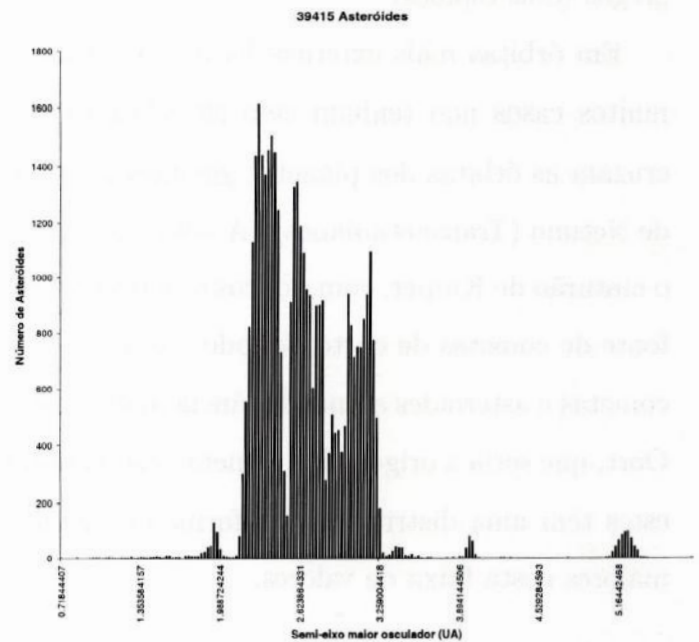
Como foi inicialmente observado por Kirkwood, a distribuição dos asteróides do cinturão não é uniforme. Kirkwood observou na distribuição de semi-eixos maiores uma série de concentrações e lacunas (hoje conhecidas como *Falhas de Kirkwood*), como pode ser facilmente observado na Figura 1.1. A proeminência destas características sugere que haja um processo físico importante atuando na dinâmica do Cinturão. Uma vez que os períodos orbitais são determinados pelo semi-eixo maior da órbita, estas lacunas e concentrações em semi-eixos correspondem a lacunas e concentrações nas distribuições de períodos orbitais. E, como foi logo percebido, estas lacunas e algumas destas concentrações se localizam em regiões do cinturão onde há ressonâncias de movimento médio com Júpiter, ou seja, regiões onde os períodos orbitais do asteróide e de Júpiter são comensuráveis.

A complexidade da dinâmica do Cinturão de Asteróides deve-se basicamente à influência gravitacional dos planetas. O problema gravitacional de N corpos não tem solução analítica para $N > 2$, como foi mostrado por Poincaré no final do século XIX. Desta forma, para estudar as órbitas no Cinturão é necessário recorrer a aprox-

4CAPÍTULO 1. OS ASTERÓIDES E SUAS CARACTERÍSTICAS: INTRODUÇÃO



(a) Divisão de 0.02UA, com a localização das principais ressonâncias de movimento médio com Júpiter (Adaptado de Dermott e Murray, 1999)



(b) Dados atualizados até 27 de abril de 2002. Foram utilizados os 39415 asteróides com semi-eixo maior osculador menor que 6 UA, dos 39462 asteróides numerados até esta data.

Figura 1.1: Histogramas da distribuição de asteróides por semi-eixo maior, que evidenciam a localização das falhas de Kirkwood nas ressonâncias.

imações ou a integrações numéricas. Como estas integrações numéricas dependem de uma grande capacidade computacional elas não podiam ser implementadas, até por volta da década de 1960, embora só tenha sido possível que elas adquirissem importância a partir do final da década de 1970, e só tenham se tornado comuns e acessíveis no final da década de 1980. Assim, os trabalhos clássicos tiveram que se basear em estudos analíticos aproximados.

Na ausência de perturbações, são constantes os elementos orbitais que definem a órbita Kepleriana. Classicamente costumam ser usados os elementos: semi-eixo maior (a), excentricidade (e), inclinação (i), longitude do nodo ascendente (Ω), argumento do periélio (ω) e, para o último, que é o que apenas permite localizar o

corpo ao longo da órbita, costuma-se utilizar o instante de passagem pelo periélio (T_0), ou a anomalia verdadeira (f ou w), ou a longitude média no instante T_0 (ϵ). Com a perturbação sobre o movimento Kepleriano, a princípio não mais podem ser definidos os elementos orbitais clássicos, pois o movimento não mais é uma cônica. Mas quando as perturbações são pequenas, o movimento do corpo de interesse é próximo do que ele teria no problema de dois corpos, e pode-se definir em um certo instante de tempo os *elementos orbitais osculadores*, que são os elementos orbitais obtidos ao tomar a posição e a velocidade do corpo naquele instante e calculando os elementos orbitais da órbita Kepleriana que seria seguida caso não houvesse perturbações. Os elementos osculadores são os elementos orbitais da órbita Kepleriana que resultaria, naquele instante de tempo, na mesma posição e velocidade que a posição e a velocidade reais. Neste tipo de interpretação, o efeito da perturbação pode ser visto como gerar uma variação na "órbita instantânea" (a definida pelos elementos osculadores). Desta forma, na presença de perturbações os elementos orbitais não são mais constantes, de forma que outros parâmetros devem ser utilizados caso se queira constantes para definir uma trajetória. Estes parâmetros constantes, quando possíveis de se obter, podem ser usados para definir os *elementos orbitais próprios*.

A definição precisa dos elementos próprios a serem usados varia, uma vez que um conjunto de parâmetros que em uma situação específica é constante pode não mais ser constante em outros casos. Uma opção comum vem da Teoria Secular: a solução obtida da Teoria Secular para os elementos osculadores médios é uma superposição de oscilações harmônicas; as amplitudes destas oscilações são então escolhas naturais para os elementos próprios. Outra possibilidade é a utilização dos valores médios dos elementos osculadores, que em alguns problemas se mantêm constantes por escalas de tempo suficientemente longas. De uma forma geral, as definições de elementos próprios são mais difíceis em sistemas ressonantes. A princípio qualquer conjunto de parâmetros constantes para uma trajetória poderia ser usado como um conjunto de elementos próprios, mas procura-se definir elementos que tenham uma associação direta com os osculadores, de forma a tornar mais conveniente o seu estudo, para

6CAPÍTULO 1. OS ASTERÓIDES E SUAS CARACTERÍSTICAS: INTRODUÇÃO

que seja possível apenas se referir a semi-eixo maior, excentricidade e inclinação próprios, evitando que seja necessário especificar como eles foram definidos, caso o interesse não esteja na sua definição e cálculo. Como os outros três elementos osculadores são de menos interesse em geral não há uma definição de elementos próprios correspondentes a eles; e em muito casos nem é possível definí-los, embora possa se obter as ações associadas a eles.

De uma forma qualitativa, os elementos próprios podem ser vistos como a constantes de movimento do corpo considerado, ou como elementos orbitais dos quais foram removidos os efeitos das perturbações. Este tipo de interpretação é suficiente para as discussões que se seguem sobre o uso dos elementos próprios para o estudo de famílias de asteróides, e permite que se tenha uma idéia de por que é difícil obter elementos próprios em sistemas muito caóticos (Knežević, 1994).

Apesar de as órbitas dos asteróides serem aproximadamente elípticas e o efeito gravitacional dos planetas ser apenas o de pequenas perturbações sobre os asteróides, a longo prazo estas perturbações podem se mostrar importantes. As falhas de Kirkwood são a evidência mais imediata da influência de Júpiter sobre a estabilidade das órbitas no cinturão, pois indicam que algumas ressonâncias, como a 3:1, devem gerar uma forte instabilidade, enquanto outras devem resultar em órbitas estáveis, como a 3:2. Dos trabalhos clássicos de Laplace, Lagrange e Poincaré, já era bem conhecido que em uma "primeira aproximação" (Teoria Secular) as órbitas dos planetas são estáveis, assim como órbitas não ressonantes do Cinturão. A Teoria Secular consiste essencialmente em tratar do problema gravitacional de N corpos ($N > 2$) considerando apenas algumas das perturbações existentes, de forma a ser possível obter uma solução analítica para a variação dos elementos orbitais devida a estas perturbações (Brouwer e van Woerkom, 1950). Um resultado da Teoria Secular é a existência de outro tipo de ressonância, as seculares, que consistem basicamente em comensurabilidades das taxas de precessão das órbitas. Ao verificar a distribuição dos asteróides no espaço dos elementos orbitais a, e, i (semi-eixo maior, excentricidade e inclinação), vê-se claramente que nas regiões das ressonâncias seculares há

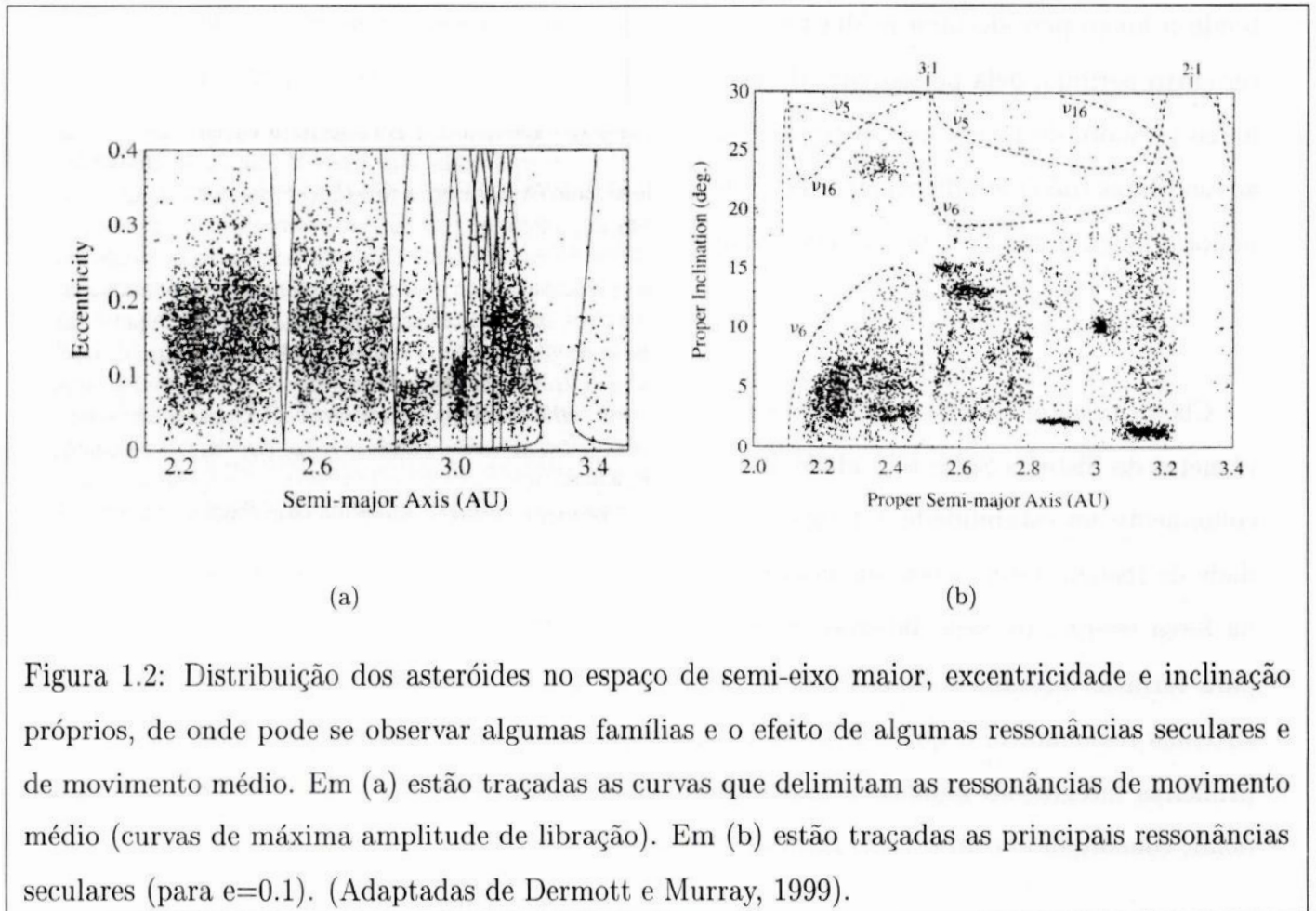


Figura 1.2: Distribuição dos asteróides no espaço de semi-eixo maior, excentricidade e inclinação próprios, de onde pode se observar algumas famílias e o efeito de algumas ressonâncias seculares e de movimento médio. Em (a) estão traçadas as curvas que delimitam as ressonâncias de movimento médio (curvas de máxima amplitude de libração). Em (b) estão traçadas as principais ressonâncias seculares (para $e=0.1$). (Adaptadas de Dermott e Murray, 1999).

lacunas muito bem definidas, indicando que nestas ressonâncias as órbitas também são instáveis (Figura 1.2).

Uma outra interpretação de como as ressonâncias têm mais influência que os efeitos de perturbações não ressonantes vem do fato de estas corresponderem a situações nas quais uma mesma configuração geométrica se repete periodicamente, fazendo com que uma mesma perturbação seja aplicada de forma prolongada; assim, mesmo sendo pequena ela pode se tornar importante com a sua repetição continuada a longo prazo; as perturbações não ressonantes ocorrem em configurações geométricas que mudam continuamente, de forma que se torna mais difícil que o seu efeito acumulado se torne apreciável. Outra forma de ver este fenômeno consiste no fato de que as perturbações de curto período não ressonantes oscilam rapidamente,

SCAPÍTULO 1. OS ASTERÓIDES E SUAS CARACTERÍSTICAS: INTRODUÇÃO

tendo a longo período uma média nula. E as perturbações ressonantes deixam de ter curto período, pela persistência de uma mesma configuração do sistema por um longo período, de forma que os termos ressonantes se tornam termos semelhantes aos seculares (não periódicos) ou aos de longo período, tendo então uma importância maior a longo prazo, já que sua média não se anula rapidamente.

Classicamente, em vista da teoria secular de Lagrange-Laplace, e do fato que os planetas do Sistema Solar têm idade da ordem de 4.5 bilhões de anos, acreditava-se comumente na estabilidade a longo período do Sistema Solar. Com a possibilidade de realizar integrações numéricas veio a possibilidade de "resolver o problema na força bruta", ou seja, integrar as equações de movimento por longos períodos para verificar diretamente o efeito das perturbações, sendo possível ainda tratar de sistemas ressonantes, o que é feito de forma muito limitada analiticamente. E as primeiras integrações numéricas indicavam uma aparente estabilidade no Sistema Solar, concordando com a visão geral da época.

Mas quando se tornaram possíveis integrações de longo período, foi possível que se percebesse que a dinâmica do Sistema Solar, e particularmente do Cinturão de Asteróides, é extremamente complexa, e permeada de regiões instáveis. A ação das ressonâncias foi identificada como a origem de várias das falhas observadas no Cinturão (Wisdom, 1982, 1983 e 1991, Dermott e Murray, 1999, Ferraz-Mello, 1999). Nestas regiões, de grande caoticidade, as órbitas dos asteróides são levadas, a longo prazo, a variar principalmente em excentricidade e inclinação, e o aumento da excentricidade torna-se um fator de grande importância quando ele é suficiente para que a órbita do asteróide passe a cruzar as de outros planetas. Os encontros próximos com estes planetas ou com o Sol podem alterar significativamente as órbitas, removendo-as definitivamente da região que inicialmente ocupavam.

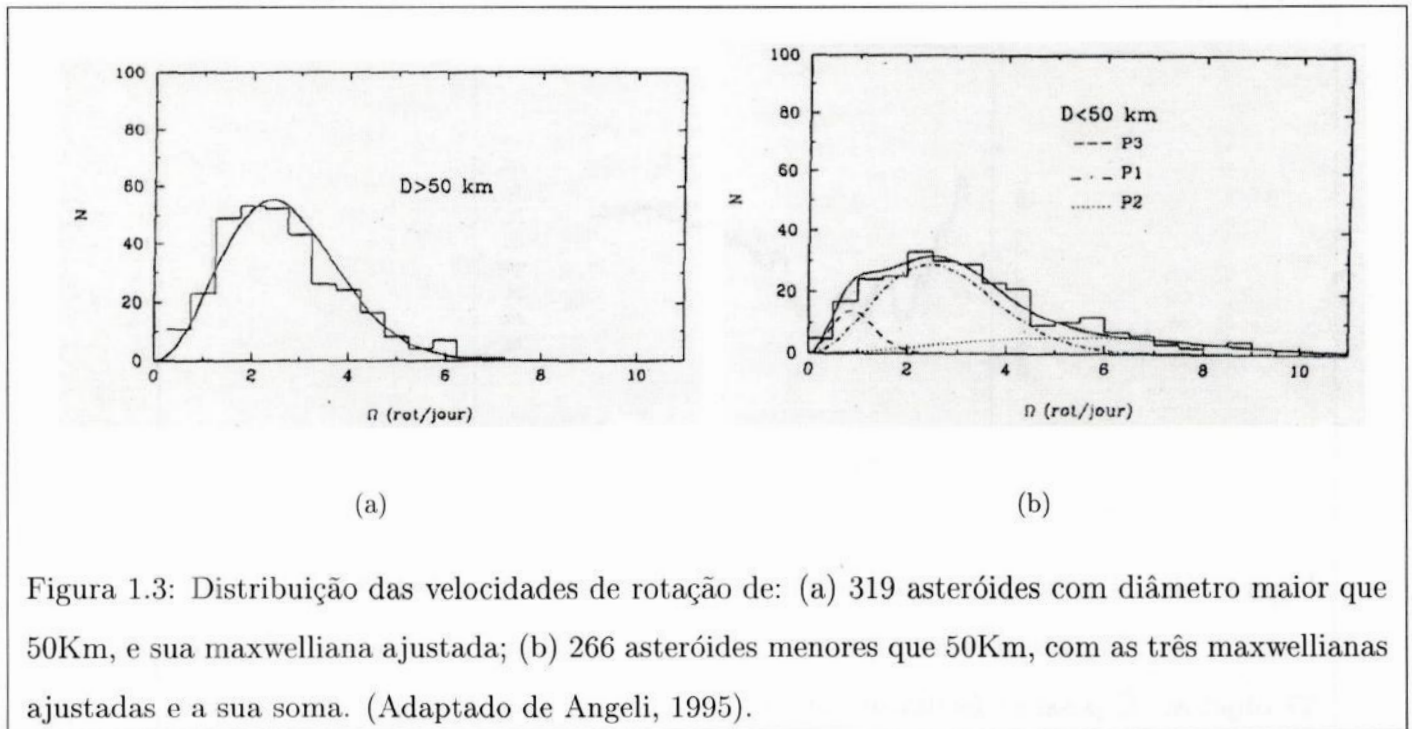


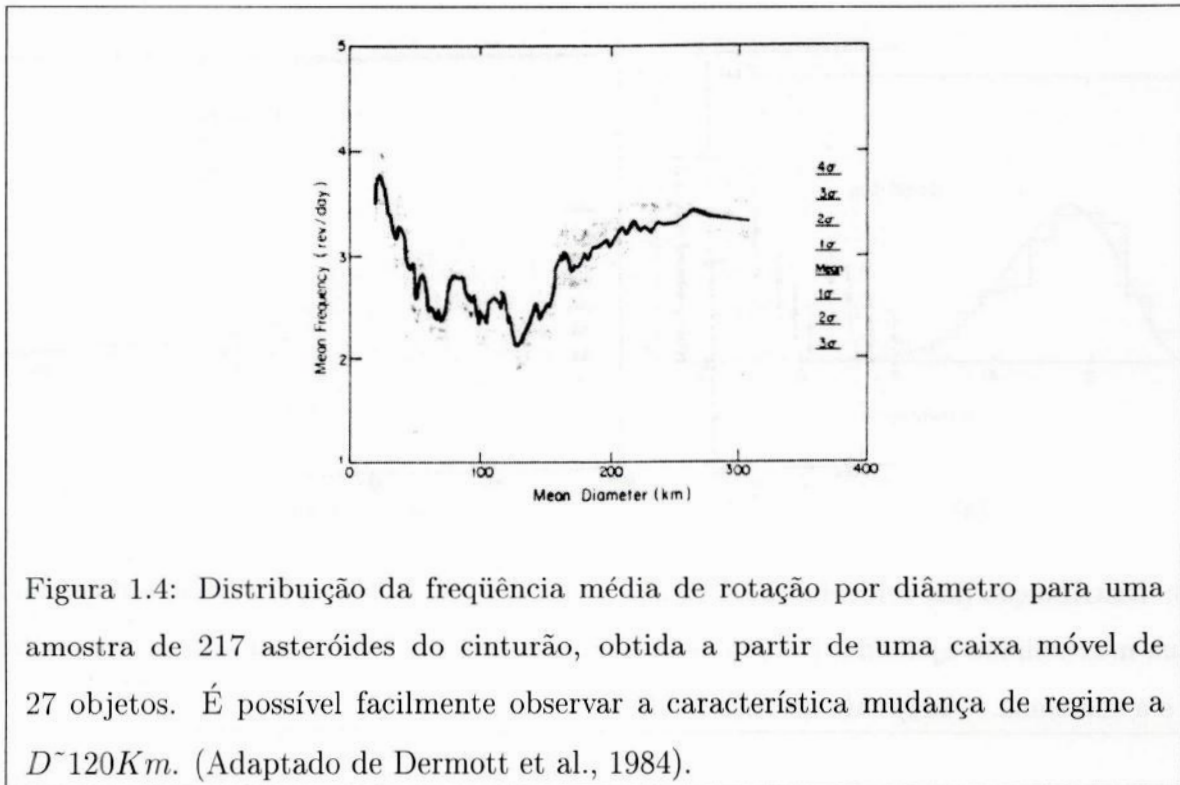
Figura 1.3: Distribuição das velocidades de rotação de: (a) 319 asteróides com diâmetro maior que 50Km, e sua maxwelliana ajustada; (b) 266 asteróides menores que 50Km, com as três maxwellianas ajustadas e a sua soma. (Adaptado de Angeli, 1995).

1.3 Propriedades Rotacionais e Físicas dos Asteróides

Outra característica dinâmica importante dos asteróides é a sua rotação. E apesar de atualmente muitos asteróides terem seu período de rotação já medido e de se considerar ser uma informação importante para estudar a origem e formação dos asteróides, é ainda muito pouco compreendida.

As Figuras 1.3 e 1.4 representam a distribuição observada de períodos de rotação e a distribuição de períodos por tamanho, respectivamente. A característica mais notável da distribuição geral de períodos é que o máximo da distribuição fica em torno de 9 horas, tanto para os asteróides grandes quanto para os pequenos. E observa-se também que os asteróides grandes distribuem-se em uma população única, enquanto os pequenos possuem duas populações menores, com máximos nos períodos 4h e 24h . É importante notar que estas duas populações sofrem de uma forte tendência observacional, e ela é oposta para cada uma.

A determinação do período rotacional é feita através de uma série de medidas fotométricas da magnitude, em geral obtidas ao longo de 2 ou 3 noites seguidas



de observação. Ao comparar a sua magnitude com a de outras estrelas observadas na mesma imagem (consideradas de brilho constante, o que pode ser verificado ao comparar entre si estas estrelas), a variação na diferença de magnitude pode ser então atribuída à variação do brilho aparente do asteroide - ao comparar com estrelas da mesma imagem se está removendo a contribuição de efeitos atmosféricos e instrumentais, que a princípio atuam de mesma forma sobre toda a imagem (técnica conhecida como fotometria diferencial). Esta variação de curto período do brilho aparente do asteroide é normalmente atribuída ao efeito da sua rotação, ao mudar a região iluminada e visível do asteroide. Como os asteroides são pequenos o suficiente para que possam ter uma forma diferente de axisimétrica (como seria caso sua massa fosse grande o suficiente para que eles fossem forçados a assumir uma figura de equilíbrio hidrostático), bem como podem ter uma superfície de composição não homogênea, ao girar o seu brilho vai variar de forma em geral mensurável, como representado na Figura 1.5. A curva de luz resultante desta série de medidas a

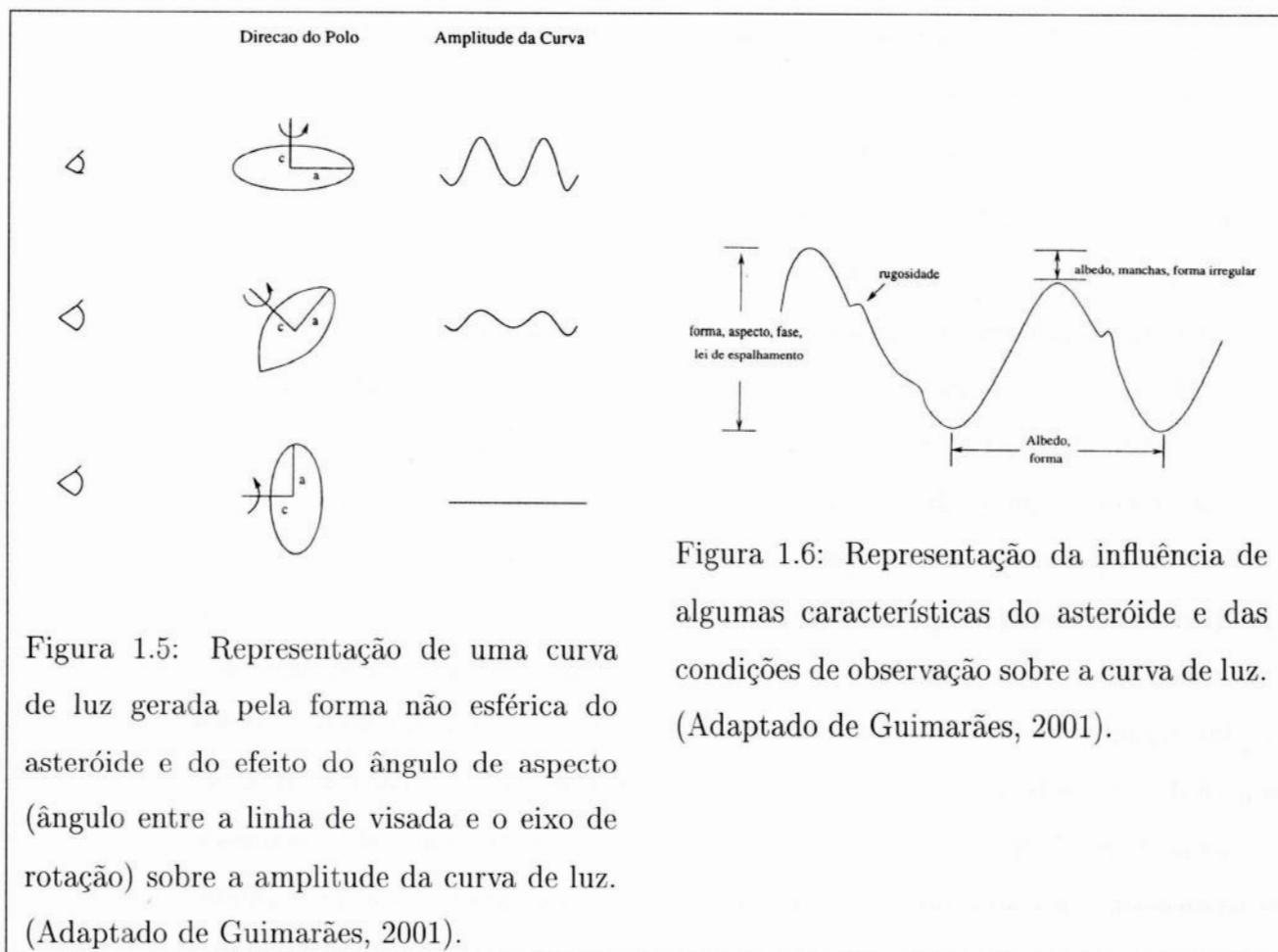


Figura 1.6: Representação da influência de algumas características do asteróide e das condições de observação sobre a curva de luz. (Adaptado de Guimarães, 2001).

Figura 1.5: Representação de uma curva de luz gerada pela forma não esférica do asteróide e do efeito do ângulo de aspecto (ângulo entre a linha de visada e o eixo de rotação) sobre a amplitude da curva de luz. (Adaptado de Guimarães, 2001).

princípio permite então medir o período de rotação do asteróide, caso a série cubra ao menos um período. Daí vem o efeito de seleção na medida dos períodos, pois os asteróides de curto período (menores que 6 horas) necessitam de um período de observações mais curto, sendo em geral possível obtê-lo com poucas noites de observação. Uma exceção são os de curtíssimo período (períodos menores que 1 hora), recentemente descobertos, que exigem técnicas diferentes de fotometria, para obter muitas imagens em um período muito curto de tempo. Já os asteróides de longo período (maior que 12h) são fortemente desfavorecidos, pois dependem de muitas noites de observação, sendo particularmente desfavoráveis os com período próximo de múltiplos de 24h, pois ao se observar em várias noites seguidas está se observando sempre a mesma fase.

12CAPÍTULO 1. OS ASTERÓIDES E SUAS CARACTERÍSTICAS: INTRODUÇÃO

Desta forma, o fato de a população observada de longo período ser maior que a de curto período é significativo, pois é o contrário da tendência observacional, uma vez que os de longo período são desfavorecidos.

Estas características foram percebidas desde as primeiras análises da distribuição dos períodos de rotação, apesar das pequenas amostras disponíveis então. Alfvén em 1964 já havia notado uma concentração maior em torno do período de 9 horas; Harris e Burns (1979), Burns e Tedesco (1979), Tedesco e Zappalà (1980), Dermott e Murray (1982), Dermott et al. (1984) notaram que os asteróides pequenos têm uma dispersão maior, o que pode ser o resultado da presença de populações diferentes. Desde então especula-se sobre o que explicaria estas populações, embora até hoje haja apenas considerações qualitativas, sem que haja um modelo capaz de justificá-las precisamente. Este período de máximo é próximo ao período de rotação dos planetas gigantes, o que levou logo a especulações sobre a possibilidade de este ser um período primordial, comum a todos os corpos na época de formação do Cinturão, e que os períodos diferentes teriam sido resultado da evolução colisional subsequente dos asteróides. Esta interpretação é coerente com o fato de os asteróides grandes terem uma única população e terem uma dispersão menor, uma vez que é mais difícil mudar colisionalmente o período dos asteróides maiores. Como será discutido mais adiante, o fato de em geral ser considerado que os asteróides menores se originaram de fragmentação dos maiores também poderia justificar a presença de uma maior dispersão e de três populações.

O problema com este tipo de interpretação está na falta de um conhecimento preciso do efeito das colisões sobre a rotação e de como a rotação é alterada e criada em uma fragmentação. A falta de modelos para rotação, colisão e fragmentação se deve à grande complexidade destes três processos, que devem ser interligados, não podendo ser estudados separadamente. É um problema bem conhecido na física dos sólidos não haver modelos gerais para a fragmentação de corpos sólidos, em especial fragmentação colisional, pois são processos que envolvem forças de coesão do material, forças de contato e processos de dissipação de energia que não são bem conhecidos

nem individualmente, nem seus efeitos mútuos. Além disso, é um problema bem conhecido na Mecânica Clássica a dificuldade inerente ao tratamento de rotações, mesmo a de corpos rígidos. Todos estes problemas dificultam muito a criação de modelos que permitam obter informações quantitativas e mesmo qualitativas para avaliar estas hipóteses sobre origem e evolução colisional dos asteróides.

Tradicionalmente, para a distribuição geral dos períodos de rotação procura-se ajustar curvas maxwellianas. Para os asteróides grandes este ajuste é melhor obtido, enquanto que os pequenos têm uma distribuição mais dispersa, melhor ajustada por três maxwellianas, representando as diferentes populações observadas (Angeli, 1995). Como as maxwellianas são a curva esperada para a distribuição de velocidades de uma população evoluída colisionalmente através de colisões elásticas aleatórias com uma distribuição de orientações uniforme, este resultado poderia indicar que os asteróides maiores seriam primordiais e já teriam passado por uma evolução colisional, atingindo uma distribuição estável de velocidades de rotação. Os menores, por outro lado, poderiam ser fragmentos e que por serem mais novos ainda não puderam atingir o equilíbrio em sua distribuição de velocidades de rotação (Binzel et al., 1989). Mas como apontado por Farinella e colaboradores (1981) esperar que os asteróides sigam populações maxwellianas é bastante questionável por motivos físicos, e pode nem ser algo razoavelmente sustentável observacionalmente.

Outra fonte de especulações foi, desde sua primeira identificação por Dermott e Murray (1982), da característica mais marcante da distribuição de períodos de rotação por tamanho dos asteróides (Figura 1.7): a mudança súbita da inclinação da curva a diâmetros próximos de 100Km. Inicialmente, era questionado se esta característica não seria apenas um artefato de tendências observacionais, pois é mais fácil observar asteróides grandes, mas os maiores são mais axisimétricos, o que dificulta a medida de seu período. Mas com o aumento da completeza da base de dados permaneceu a distribuição em "forma de V". Desta forma, há uma forte sugestão da presença de dois processos diferentes, que atuam em regimes bem definidos, de forma a tornar a transição de um para outro tão bem definida em

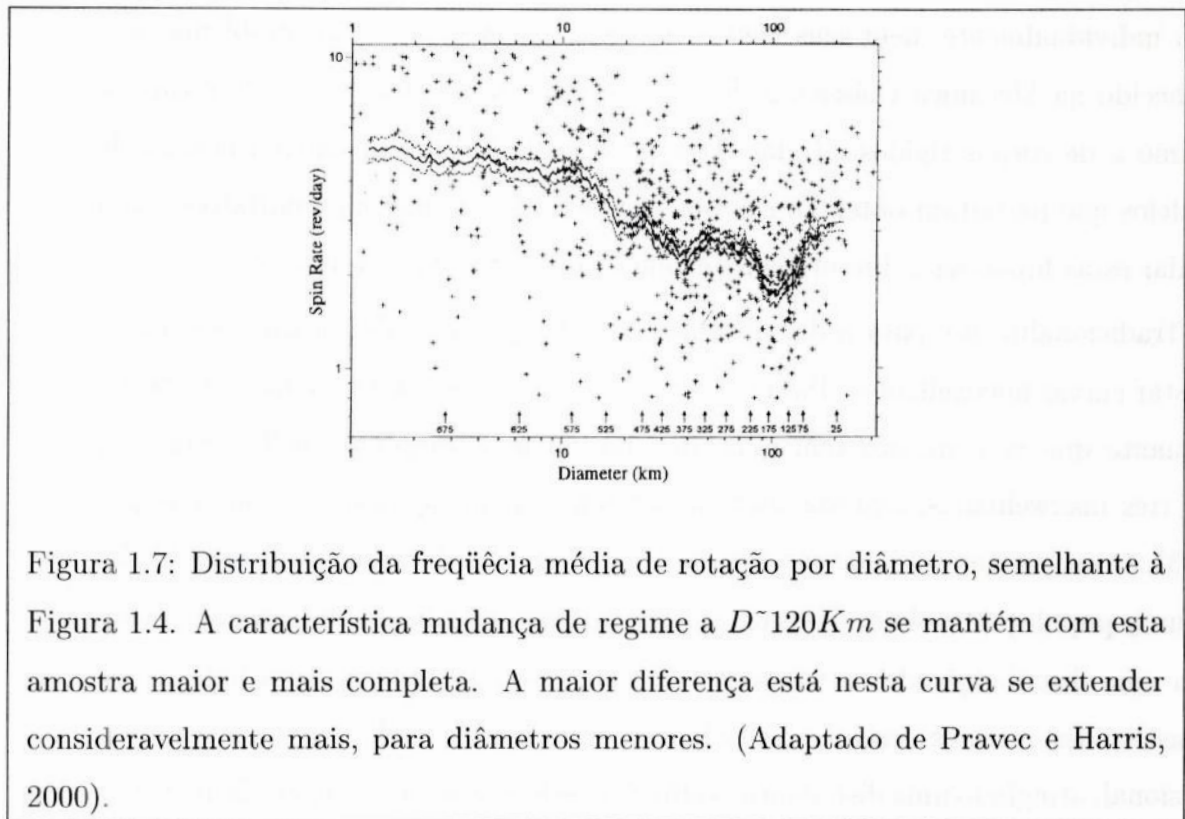


Figura 1.7: Distribuição da frequência média de rotação por diâmetro, semelhante à Figura 1.4. A característica mudança de regime a $D \sim 120 \text{ Km}$ se mantém com esta amostra maior e mais completa. A maior diferença está nesta curva se estender consideravelmente mais, para diâmetros menores. (Adaptado de Pravec e Harris, 2000).

diâmetro.

Ao observar a distribuição em diâmetros dos asteróides vê-se uma descontinuidade na sua inclinação em torno de 60Km, mas nada na faixa 100-150Km; em geral as distribuições são semelhantes a leis de potência, como pode ser visto na Figura 1.8. A hipótese inicialmente levantada para explicar a mudança na curva da distribuição de períodos por tamanho foi de esta descontinuidade representar a mudança de um regime onde a autogravitação do asteróide seja desprezível para um onde ela passe a ter importância. Outra especulação, que não exclui a primeira, é que nesta faixa de tamanho haja uma transição entre os asteróides que são primordiais e os que foram gerados por fragmentações. Esta hipótese tem como maior problema a ausência de uma descontinuidade correspondente na distribuição de tamanhos, o que a princípio seria razoável caso houvesse uma diferenciação bem definida de tamanho entre asteróides primordiais e os produtos de colisão.

É bastante notável na distribuição dos asteróides no espaço de fase dos elementos

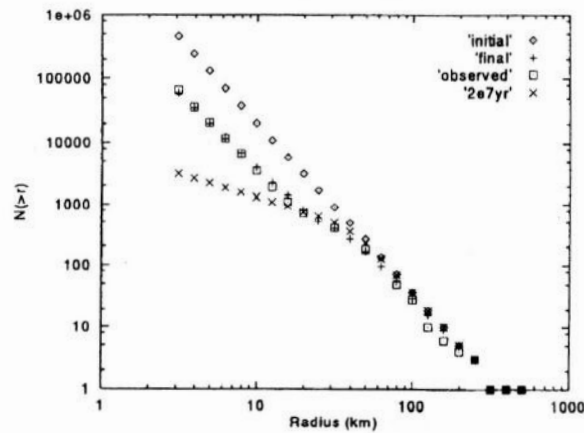


Figura 1.8: Distribuição observada de tamanhos no cinturão de asteróides (quadrados abertos), superposta a alguns modelos de evolução colisional (notar que a escala do gráfico é dada em raio, e não diâmetro, como em geral referido no texto). (Adaptado de Gil-Hutton e Brunini, 1999).

próprios a presença de várias concentrações tridimensionais (espaço de a, e, i próprios, como mostrado na Figura 1.9). Estes agrupamentos foram inicialmente observados por Hirayama (Hirayama, 1918, Kozai, 1994), ao examinar a distribuição dos elementos osculadores $e, i, \bar{\omega} = \Omega + \omega$ e verificar que alguns grupos de asteróides se distribuía em círculos, como mostrado na Figura 1.10. Sabendo que a solução da Teoria Secular para os elementos osculadores médios consiste da superposição de uma componente livre (própria) com uma circulação forçada pela perturbação, a sugestão imediata destes gráficos foi de que os asteróides sobre o mesmo círculo corresponderiam a asteróides com a mesma componente livre, sendo levados a circular em torno deste valor (próprio) pela componente forçada. Ao calcular os elementos próprios para estes asteróides, Hirayama de fato encontrou que eles eram semelhantes para os asteróides de um mesmo círculo, e ao fazer um gráfico do espaço dos elementos próprios estas concentrações ficaram mais evidentes, permitindo identificar outras. Testes de significância estatística mostraram que estes grupos representam algum fenômeno físico, uma vez que têm uma baixa probabilidade de ocorrerem ao

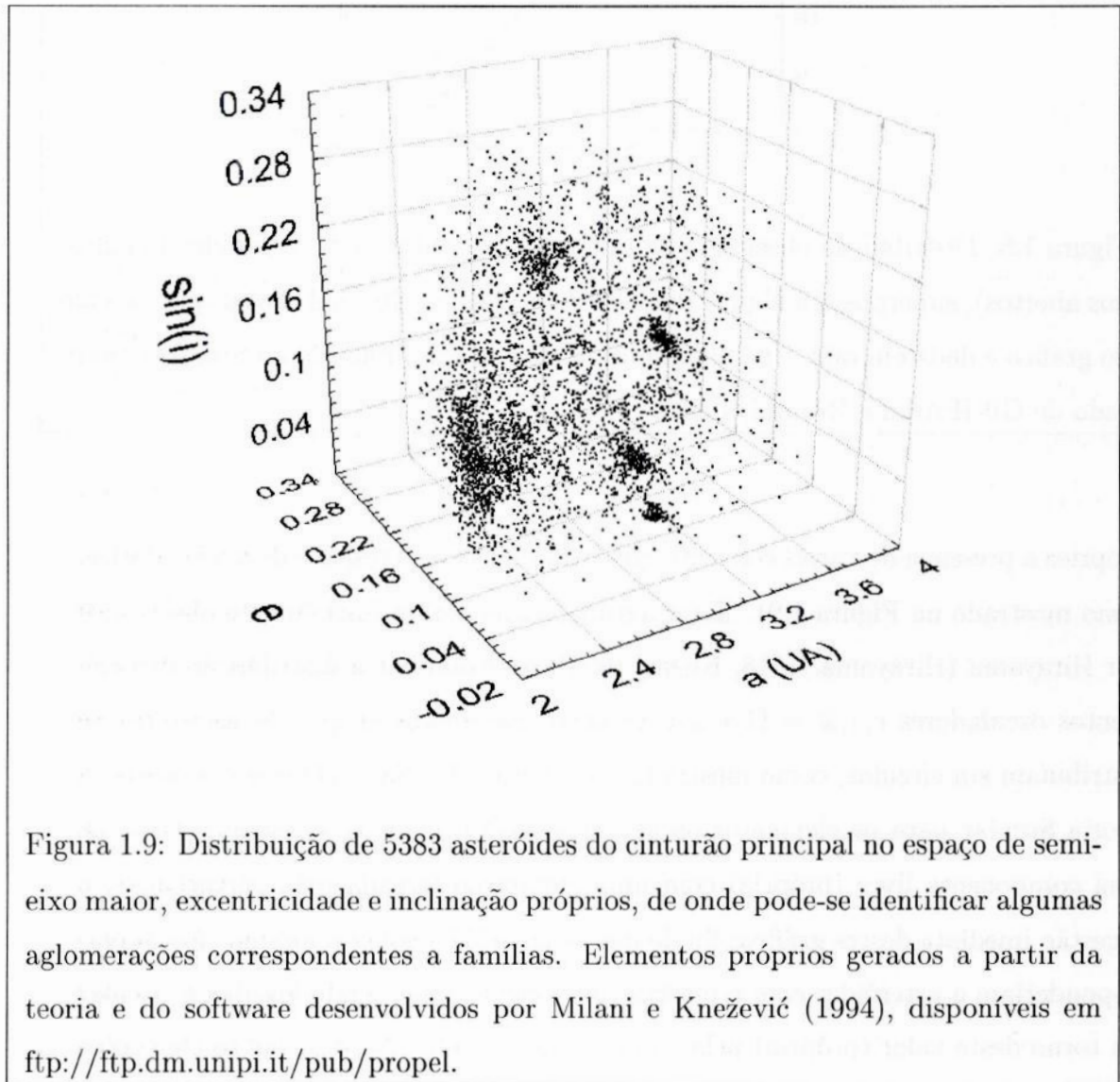


Figura 1.9: Distribuição de 5383 asteróides do cinturão principal no espaço de semi-eixo maior, excentricidade e inclinação próprios, de onde pode-se identificar algumas aglomerações correspondentes a famílias. Elementos próprios gerados a partir da teoria e do software desenvolvidos por Milani e Knežević (1994), disponíveis em <ftp://ftp.dm.unipi.it/pub/propel>.

acaso. Hirayama deu a estes agrupamentos o nome de famílias, e sugeriu que os membros de uma mesma família devem ter uma origem comum.

Com o aumento do número de asteróides identificados e com elementos próprios calculados, foram encontradas novas famílias e novos elementos das famílias já existentes. Hoje, à parte de diferenças de métodos particulares (Williams 1979, 1989 e 1992, Zappalà et al. 1990 e 1995, Zappalà e Cellino 1994), a identificação de famílias e grupos a partir de uma amostra de asteróides com elementos próprios calculados é feita ao estabelecer um nível de significância estatística e procurar os agrupamentos que tenham uma chance de ter sido formados ao acaso superior ao limite de significância estabelecido. Assim, ao escolher um nível baixo de significância são identificados mais grupos e com mais membros, enquanto que níveis de significância muito altos implicam em excluir muitos membros de muitas famílias, bem como deixar de identificar muitas delas. É comum ainda a designação genérica destes agrupamentos ser especificada em famílias e grupos. Ambos vêm de agrupamentos estatisticamente significativos, e a sua distinção está em os grupos serem as concentrações de asteróides segregados dinamicamente, enquanto as famílias são os restantes. As famílias não podem ser satisfatoriamente explicadas por concentrações casuais ou isolamento dinâmico, de forma que se acredita que representem asteróides que tiveram um origem comum por fragmentação colisional (Chapman et al., 1989).

Foi observado também (Figura 1.11) que em geral os asteróides pertencentes a famílias têm maiores velocidades de rotação que asteróides de mesmo tamanho que não sejam membros de famílias. O que seria mais uma indicação de que as famílias teriam origem colisional, embora não se saiba como exatamente o evento de formação de uma família determina a rotação de seus membros. Os maiores problemas com esta explicação para a origem das famílias estão na falta da compreensão de como ocorrem colisões e fragmentações e quais são os seus efeitos sobre a dinâmica dos asteróides envolvidos, e no número ainda pequeno de membros das famílias com período conhecido.

Quanto à forma, é difícil obter informações, uma vez que os asteróides são

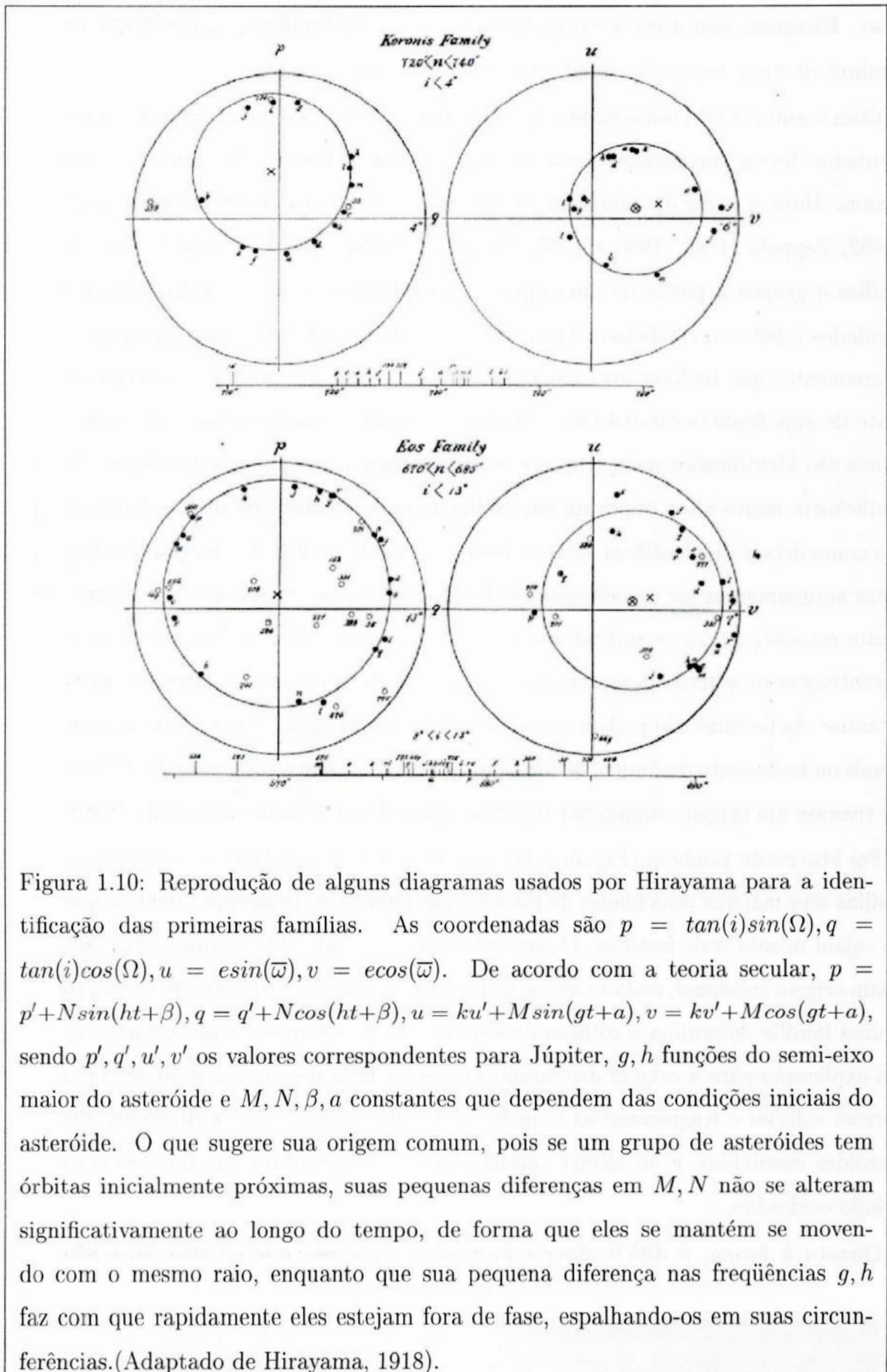
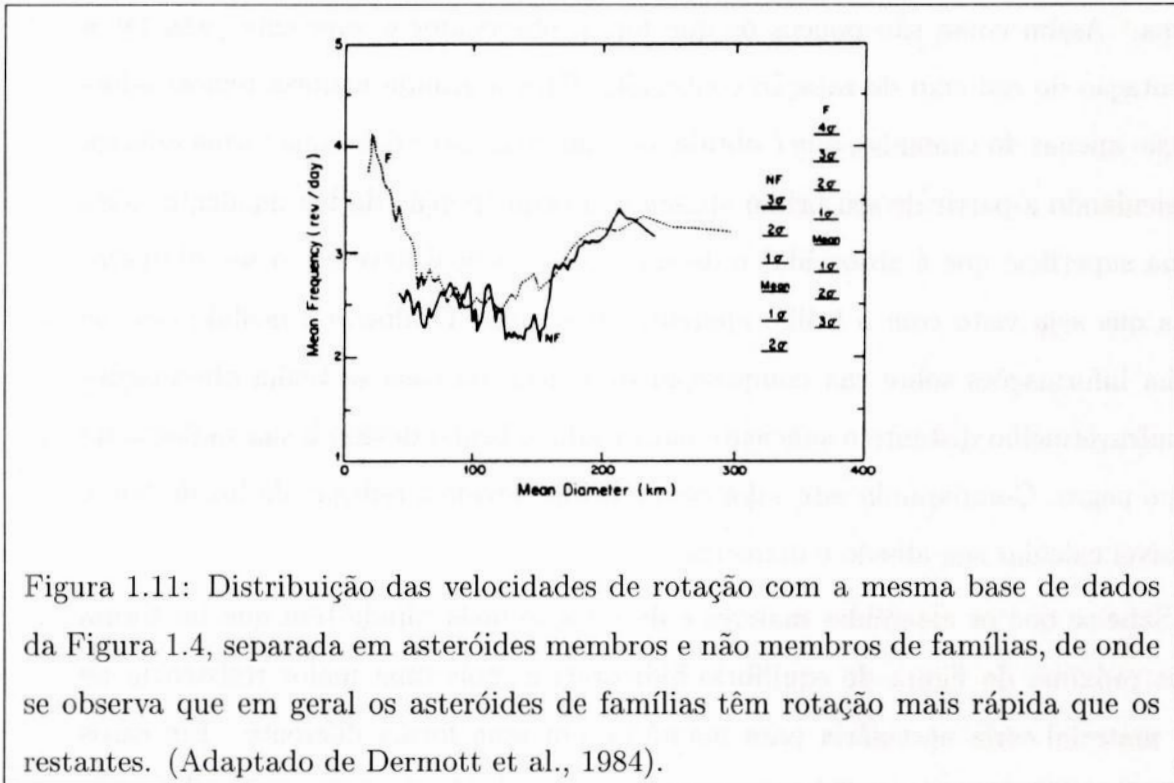


Figura 1.10: Reprodução de alguns diagramas usados por Hirayama para a identificação das primeiras famílias. As coordenadas são $p = \tan(i)\sin(\Omega)$, $q = \tan(i)\cos(\Omega)$, $u = e\sin(\bar{\omega})$, $v = e\cos(\bar{\omega})$. De acordo com a teoria secular, $p = p' + N\sin(ht + \beta)$, $q = q' + N\cos(ht + \beta)$, $u = ku' + M\sin(gt + a)$, $v = kv' + M\cos(gt + a)$, sendo p', q', u', v' os valores correspondentes para Júpiter, g, h funções do semi-eixo maior do asteroide e M, N, β, a constantes que dependem das condições iniciais do asteroide. O que sugere sua origem comum, pois se um grupo de asteroides tem órbitas inicialmente próximas, suas pequenas diferenças em M, N não se alteram significativamente ao longo do tempo, de forma que eles se mantêm se movendo com o mesmo raio, enquanto que sua pequena diferença nas frequências g, h faz com que rapidamente eles estejam fora de fase, espalhando-os em suas circunferências. (Adaptado de Hirayama, 1918).



observados como imagens estelares, não sendo possível, com raríssimas exceções, resolver a sua forma. Para alguns poucos asteroides pode-se ter informações de baixa resolução por radar, havendo informações de alta resolução apenas para os pouquíssimos asteroides que já foram observados por sondas. Para os asteroides em geral, pode-se obter algumas informações da forma ao observar extensamente suas curvas de luz. Curvas de luz onde a variação seja devida à forma devem apresentar em geral dois máximos e dois mínimos por período. Curvas de luz onde a variação seja devida primariamente à não homogeneidade da superfície devem apresentar em geral apenas um máximo e um mínimo por período. Com curvas de luz bem medidas e se estendendo por um longo período, mais informações podem ser obtidas, como ilustrado na Figura 1.6, embora seja difícil obter informações não ambíguas a partir de curvas de luz e seja necessário curvas excepcionalmente bem observadas para se obter estas informações.

Desta forma são poucos os asteroides para os quais se conhece algo sobre sua

forma. Assim como são poucos os que foram observados o suficiente para ter a orientação do seu eixo de rotação conhecida. Para a grande maioria tem-se informação apenas do tamanho, que é obtida associando ao asteróide uma forma esférica e calculando a partir de seu brilho aparente, albedo (porção da luz incidente sobre a sua superfície que é absorvida) e de sua distância qual deve ser o seu diâmetro para que seja visto com o brilho aparente observado. O albedo é medido caso se tenha informações sobre sua composição superficial ou caso se tenha observações no infravermelho distante o suficiente para medir o brilho devido à sua radiação de corpo negro. Comparando este valor com o brilho devido à reflexão da luz do Sol, é possível calcular seu albedo e diâmetro.

Sabe-se que os asteróides maiores e de rotação mais rápida têm que ter forma mais próxima da figura de equilíbrio hidrostático, pois uma maior resistência de seu material seria necessária para mantê-los em uma forma diferente. Em casos extremos, há alguns asteróides de rotação muito rápida para os quais sabe-se de forma não ambígua que têm que ser corpos monolíticos, pois caso contrário não resistiriam à força centrífuga (Pravec e Harris, 2000). Mas de uma forma geral sabe-se muito pouco sobre as formas dos asteróides, havendo para os que se têm informação da forma apenas o suficiente para associar a eles um elipsóide (muitas vezes limitado a um elipsóide de revolução).

Quanto à composição, já há muito tempo se identificou que os asteróides apresentam propriedades fotométricas (albedo, cores e de polarização da luz) e espectroscópicas diferentes. Estas primeiras constatações foram suficientes para permitir as primeiras classificações baseadas em propriedades superficiais dos asteróides. Fazendo apenas uma descrição muito geral, as taxonomias clássicas, iniciadas com a CMZ (Chapman et al., 1975), a de Bowell (Bowell et al., 1978) e a de Tholen (Tholen, 1989), baseavam-se de nas mesmas classes principais: C e S. Posteriormente, classificações mais detalhadas subdividiram e redefiniram estas classes em muitas outras, chegando-se a taxonomias bastante complexas onde os elementos de uma mesma classe têm propriedades observadas bastante específicas (para uma re-

visão completa, ver Carvano 2002). A designação geral veio das semelhanças entre as propriedades observadas dos asteróides e de meteoritos conhecidos: carbonáceos (classe C), rochosos (formados por silicatos, classe S) e os metálicos (classe M). Esta associação se deve à origem dos meteoritos ser comumente atribuída a asteróides do cinturão que por algum mecanismo foram transportados para órbitas cruzadoras da Terra. Em geral o mecanismo responsável é a ação de ressonâncias que aumentam a excentricidade, fazendo com que estes asteróides alcancem a órbita da Terra; encontros próximos com planetas ou colisões entre asteróides podem estar também presentes no caminho seguido por alguns meteoritos para chegar à Terra.

Em análises dos períodos de rotação foi encontrado ainda que os asteróides de tipo M têm velocidades de rotação maiores que os de tipo taxonômico S, que por sua vez são mais rápidos que os de tipo C. Não foram encontradas evidências de algum gradiente radial de velocidades de rotação (Dermott et al., 1984)

1.4 Formação e Evolução do Cinturão de Asteróides

Desde a identificação do fato que na região onde segundo a Regra de Titius-Bode deveria haver um planeta há o Cinturão de Asteróides e que estes são muito menores que um planeta foi sugerida a hipótese de que o Cinturão seria o remanescente de um planeta que já teria existido. Mas considerando que a Regra de Titius-Bode fornece um ajuste apenas razoável para um conjunto de 7 pontos, e que Netuno e Plutão discordam com ela (Netuno tem $a = 30.1UA$ e Plutão tem $a = 39.5UA$, e a Regra de Titius-Bode previria $n=7$, com $a' = 38.8UA$ e $n=8$, com $a' = 77.2UA$), a sua importância como reveladora de um fenômeno físico é questionável. Com este nível de incerteza e com tão poucos pontos, a princípio qualquer série crescente (mesmo uma aleatória) poderia ser ajustada por uma lei semelhante com aproximadamente o mesmo nível de erro. Mas os problemas com a hipótese de destruição de um planeta vão além, ao considerar os processos físicos que devem ter atuado na formação do Sistema Solar.

Segundo os modelos padrão de formação do Sistema Solar, (Safronov, 1969), os planetas, asteróides e cometas devem ter se formado da mesma nuvem de gás e poeira que formou o Sol. Ao se condensar esta nuvem em rotação teria adquirido uma forma de disco, como atualmente é observado em muitas estrelas jovens, o que explica porque os planetas e a maioria dos asteróides têm pequenas inclinações em suas órbitas. Como nesta nuvem primordial os objetos sólidos não passavam de grãos de poeira, a fase inicial da formação dos planetas, asteróides e cometas precisaria ter sido uma aglutinação dos grãos em corpos maiores, e a sua acreção gradual. Esta acreção seria favorecida no início pelo fato de a nuvem ser aproximadamente um disco circular, de forma que as pequenas excentricidades e inclinações das órbitas dentro dela tornam as velocidades relativas entre as partículas a mínima possível, sendo então mais fácil que o resultado de seus encontros seja a formação de corpos maiores. O gás só pode estar presente na época inicial de formação do Sistema Solar, pois a pressão de radiação e o vento solar varreram em pouco tempo todo o gás livre da região. Desta forma, considerando o padrão de abundâncias químicas da atmosfera do Sol (que deve ser o mesmo que o da nuvem que o formou, uma vez que os elementos produzidos pelo Sol pela sua atividade não são transportados até a sua superfície, estando ainda restritos ao seu núcleo - e portanto não observáveis) e a composição dos planetas hoje pode-se obter uma estimativa da massa da nuvem que formou os planetas ao calcular quanto gás é necessário para ter, com a abundância solar, toda a massa de elementos pesados que foi capturada nos planetas. Este valor é próximo de uma massa solar, o que indica que a grande maioria do material da nuvem primordial foi removida, já que a massa atualmente restante nos planetas e asteróides é da ordem de 10^{-3} massa solar. Assim, como o gás foi essencialmente todo removido, a formação dos planetas gigantes tem que ter sido muito rápida, para que eles tenham acretado um núcleo de materiais pesados com massa grande o suficiente para reter uma atmosfera enquanto ainda havia muito gás, de forma a ser possível que eles adquirissem toda a massa de gás observada hoje. Este argumento é especialmente importante para Júpiter, que tem a maior massa e é formado em

sua maior parte de H e He, os gases mais abundantes da nuvem, e também os mais rapidamente perdidos da atmosfera de um planeta caso sua gravidade não seja ainda forte o suficiente: já que são os mais leves, são os que ocupam as camadas mais superiores da atmosfera, e também são os cujas moléculas ou átomos adquirem as maiores velocidades devido à agitação térmica do gás, sendo portanto os que mais facilmente podem conter partículas com velocidades superiores à velocidade de escape do planeta.

Uma vez formado Júpiter, a região próxima a ele deve ter sido varrida de todo o material livre, que foi consumido na formação de Júpiter, e, mais importante, a gravidade de Júpiter passou a exercer uma grande influência sobre a dinâmica de todo o Sistema Solar, em particular na região do Cinturão de Asteróides. Como inicialmente as órbitas eram pouco excêntricas e pouco inclinadas, os corpos que formaram os asteróides se encontravam com baixas velocidades relativas, de forma que era possível a sua acreção, formando corpos maiores. Mas uma vez que Júpiter se formou, a sua influência começou a tornar as órbitas mais excêntricas e inclinadas, aumentando a sua dispersão e, conseqüentemente, aumentando as velocidades relativas nas colisões destes corpos. Estas maiores velocidades de impacto fizeram com que as colisões passassem do regime onde elas resultam em acreção para o regime onde elas resultam em fragmentação, ou seja, o efeito das colisões passou a ser uma diminuição no tamanho dos corpos envolvidos.

Assim, o Cinturão de Asteróides parece corresponder ao material que por estar em uma região dinamicamente dominada por Júpiter foi impedido de continuar se acretando até a formação de um planeta. De um planeta destruído, o Cinturão passou a ser visto como o resto do material que não chegou a formar um planeta, e que tem sido gradualmente disperso pelo efeito prolongado das perturbações dos planetas. Como é sugerido pela Figura 1.12 que mostra a distribuição de matéria no Sistema Solar atual, o Cinturão parece ter contido no passado uma massa muito maior que a atual (da ordem de 10^{-3} massa terrestre). A recente descoberta de outros sistemas planetários, muitos deles com características bastante diferentes do

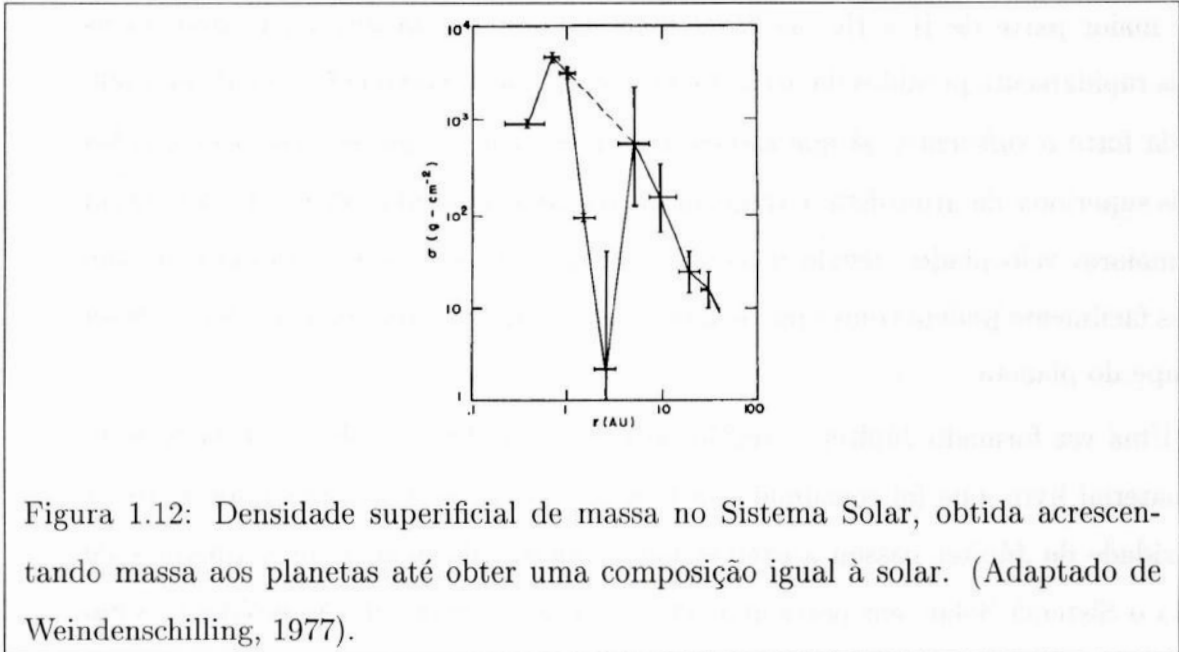


Figura 1.12: Densidade superficial de massa no Sistema Solar, obtida acrescentando massa aos planetas até obter uma composição igual à solar. (Adaptado de Weindenschilling, 1977).

nosso (presença de planetas gigantes muito próximos às estrelas e órbitas muito excêntricas) traz novas informações e muitos novos problemas para as teorias de formação de sistemas planetários. O que se sabe ao certo é que o Cinturão de Asteróides é uma importante fonte de informações dinâmicas e físicas necessárias para a compreensão dos processos de formação e evolução de sistemas planetários.

A dispersão atual das órbitas dos asteróides do Cinturão - provocada principalmente pela perturbação de Júpiter - faz com que eles tenham altas velocidades relativas médias (da ordem de 5Km/s). Segundo vários estudos estatísticos (Chapman e Davis, 1975, Farinella et al., 1982), esta dispersão faz com que a maior parte dos asteróides tenha uma alta probabilidade de já ter sofrido uma colisão capaz de levar a sua fragmentação catastrófica - o termo fragmentação catastrófica é definido como uma fragmentação na qual o maior fragmento tem massa inferior à metade do corpo alvo. Desta forma, as colisões e fragmentações devem ser um processo importante no Cinturão, e sua relação com as rotações, que deve também ser importante, é ainda desconhecida e muito pouco estudada.

Para compreender melhor os processos de colisão e fragmentação, estudos analíticos são difíceis pela grande complexidade destes problemas e a não existência de soluções

analíticas. Assim, este tipo de trabalho fica limitado a estudos baseados em aproximações que muitas vezes tornam discutível a sua validade ou a análises mais simples que levam apenas a algumas informações qualitativas. Um dos poucos trabalhos deste tipo é o de Harris (1979), que desenvolve um modelo simplificado para a evolução colisional da rotação dos asteróides. Os principais resultados obtidos são que a taxa de rotação dos asteróides grandes (nos quais a gravidade é mais importante que as forças de coesão) deve ser constante com o tamanho do asteróide, e que apenas asteróides muito pequenos ($< 1\text{Km}$) devem ser acelerados pelas colisões.

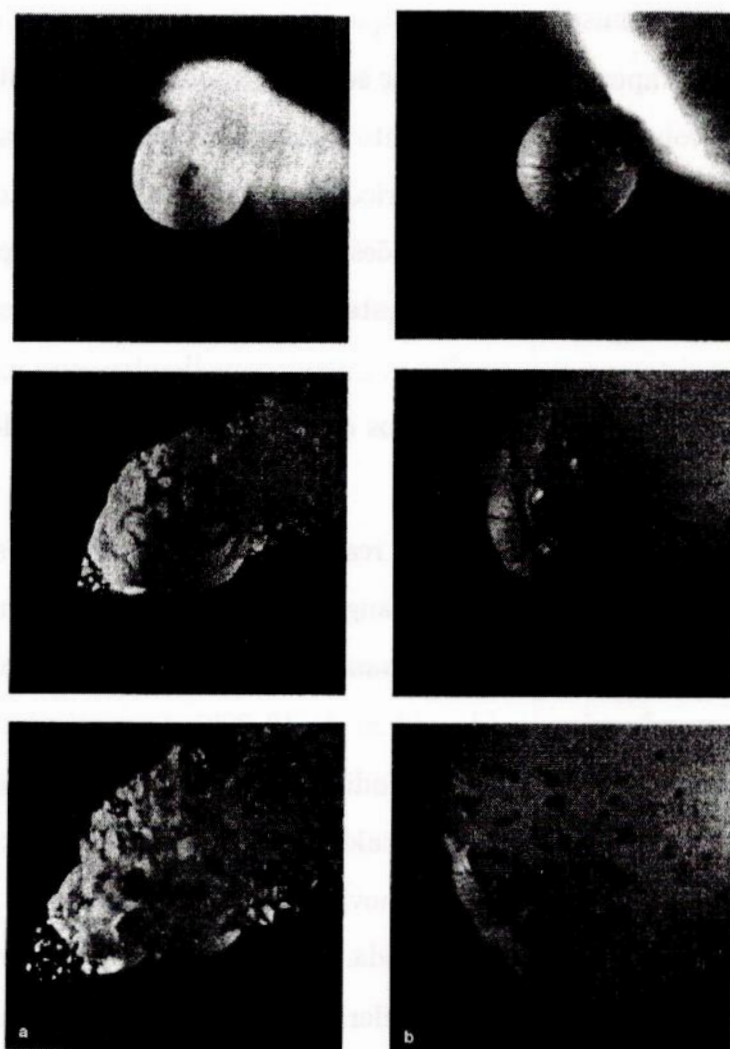
Uma forma de obter informações sobre fragmentações colisionais consiste de experimentos de laboratório. Nestes experimentos são realizados impactos com projéteis de altas velocidades, e a ejeção dos fragmentos do alvo é acompanhada por câmeras de alta velocidade para obter informações da dinâmica da fragmentação. Posteriormente, os fragmentos são recolhidos para terem analisados sua forma, massa e outras propriedades físicas. Vários autores já realizaram experimentos variados, como Davis e Ryan (1990), Davis e colaboradores, (1991) e Nakamura e Fujiwara (1991). Dentre os tipos de alvos utilizados estavam alvos homogêneos metálicos, de vidro, basálticos e de concreto. Foram realizadas também experiências com corpos não homogêneos tentando simular objetos diferenciados (com um núcleo denso e um manto menos denso) e formados por uma aglomeração fraca de fragmentos mais fortes (tanto homogêneos quanto juntando novamente os próprios fragmentos de uma colisão anterior com um alvo homogêneo). Fujiwara e coautores publicaram em 1989 uma compilação dos resultados dos experimentos até então realizados para tentar obter informações mais gerais que fossem comuns a todos eles, e uma ilustração de alguns destes experimentos está na Figura 1.13.

Um dos problemas com os impactos de laboratório está na identificação de propriedades gerais do fenômeno, que não sejam resultados particulares da colisão realizada. Os maiores problemas, no entanto, estão na grande diferença de tamanho entre os alvos de laboratório (de cm a dezenas de cm) e os asteróides (de dezenas a centenas de Km). Como nos asteróides as estruturas atômicas e moleculares têm o

mesmo tamanho que em fragmentos pequenos, esta diferença de tamanho a princípio implica em um diferente comportamento na fragmentação e na dinâmica dos fragmentos resultantes. Outro grande problema está no fato de que nos alvos de laboratório não há gravidade própria considerável, enquanto que nos asteróides maiores a sua autogravitação deve ser um fator importante. Assim, as diferenças entre os alvos de laboratório e os asteróides não são apenas de um fator de escala. E mesmo que a diferença fosse apenas um fator de escala e o comportamento dos asteróides seguisse os mesmos padrões dos alvos de laboratório, haveria o problema de que ao realizar uma extrapolação tão grande incertezas pequenas nas medidas realizadas tornam-se erros grandes nos cálculos para os asteróides. Mas estes problemas não significam que experimentos de laboratório não sejam importantes no estudo de asteróides; significa que deve ser usada cautela ao comparar e tentar aplicar as informações de laboratório aos asteróides.

As análises destas experiências se concentraram nas propriedades físicas dos fragmentos, principalmente sua forma, a localização das fragmentações no alvo e a distribuição de massa ou tamanho dos fragmentos gerados. Quanto à dinâmica, as análises foram mais restritas, se limitando em geral a análises da distribuição de velocidade e energia dos fragmentos, e de uma forma geral pouco foi estudado nestes experimentos sobre rotação. É importante lembrar que as análises dinâmicas (especialmente da rotação) são mais difíceis de serem realizadas, pois o tempo de vôo dos fragmentos até as paredes da câmara que os contém é muito curto, e todas as análises são baseadas nas imagens da fragmentação, onde muitas vezes é difícil identificar os fragmentos individualmente, principalmente os mais internos. Há ainda o efeito da gravidade da Terra, que altera as trajetórias dos fragmentos. O principal resultado comum destes experimentos foi que o principal parâmetro definindo o resultado da colisão é a sua energia específica, definida como a razão entre a energia cinética do projétil e a massa do alvo.

Uma opção que foi pouco explorada até hoje é a de estudos numéricos. Como nestes a integração das equações de movimento é feita numericamente, a princípio



(a) Alvo de alumínio,
velocidade de impacto
4.0Km/s

(b) Alvo de basalto, veloci-
dade de impacto 3.2Km/s

Figura 1.13: Imagens de impactos realizados em laboratório. Os alvos eram esferas de 6.00cm de diâmetro, e os projéteis esferas de 0.70mm de diâmetro. Os quadros correspondem aos instantes 0.1ms, 1.4ms e 2.7ms após o impacto. (Adaptado de Nakamura e Fujiwara, 1991).

é possível utilizar modelos mais elaborados e com menos aproximações. Os problemas maiores com este tipo de abordagem estão no maior consumo de tempo para computação dos sistemas mais complexos, o que foi o principal limitador de estudos numéricos até hoje, pois apenas recentemente se está dispondo de computadores capazes de lidar com o volume de processamento necessário em uma escala de tempo razoável. Outra dificuldade de estudos numéricos está, como nas experiências de laboratório, na dificuldade de se obter informações gerais, que não sejam específicas ao sistema utilizado na integração. Para obter este tipo de informação é necessário em geral integrar muitos sistemas com condições iniciais semelhantes para examinar as propriedades estatísticas da amostra de dados obtida, para permitir a identificação do efeito de cada variável.

Um dos principais trabalhos numéricos já realizados para modelar colisões e fragmentações de asteróides é o de Benz e Asphaug (1994), utilizando um modelo conhecido como SPH (*Smooth Particle Hydrodynamics*). O modelo desenvolvido divide o asteróide em um grande número (da ordem de 10 000) de partículas idênticas, sobre as quais uma equação de estado hidrodinâmica é aplicada para calcular as forças atuantes sobre cada partícula e então calcular a propagação de fraturas (onde a tensão exceder o limite do material) e o movimento de cada partícula. Nas suas modelagens iniciais a gravidade era considerada apenas através de uma pressão para dentro durante a fragmentação, sendo considerada diretamente no movimento das partículas apenas quando terminada a fragmentação - segundo os autores, o que era possível de ser feito devido à escala de tempo da fragmentação ser muito menor que a dos movimentos gerados pela gravidade.

O código gerado calcula a partir das condições iniciais a formação de novos fragmentos e o seu subsequente movimento. Os dados de saída são a forma de cada fragmento, sua posição e velocidade completa (rotação e translação tridimensional) e as tensões atuantes em cada partícula. Os primeiros testes deste modelo foram feitos ao tentar reproduzir os impactos em laboratório de Fujiwara e coautores (1989). De uma forma geral os resultados do modelo (sendo analisados principalmente a forma

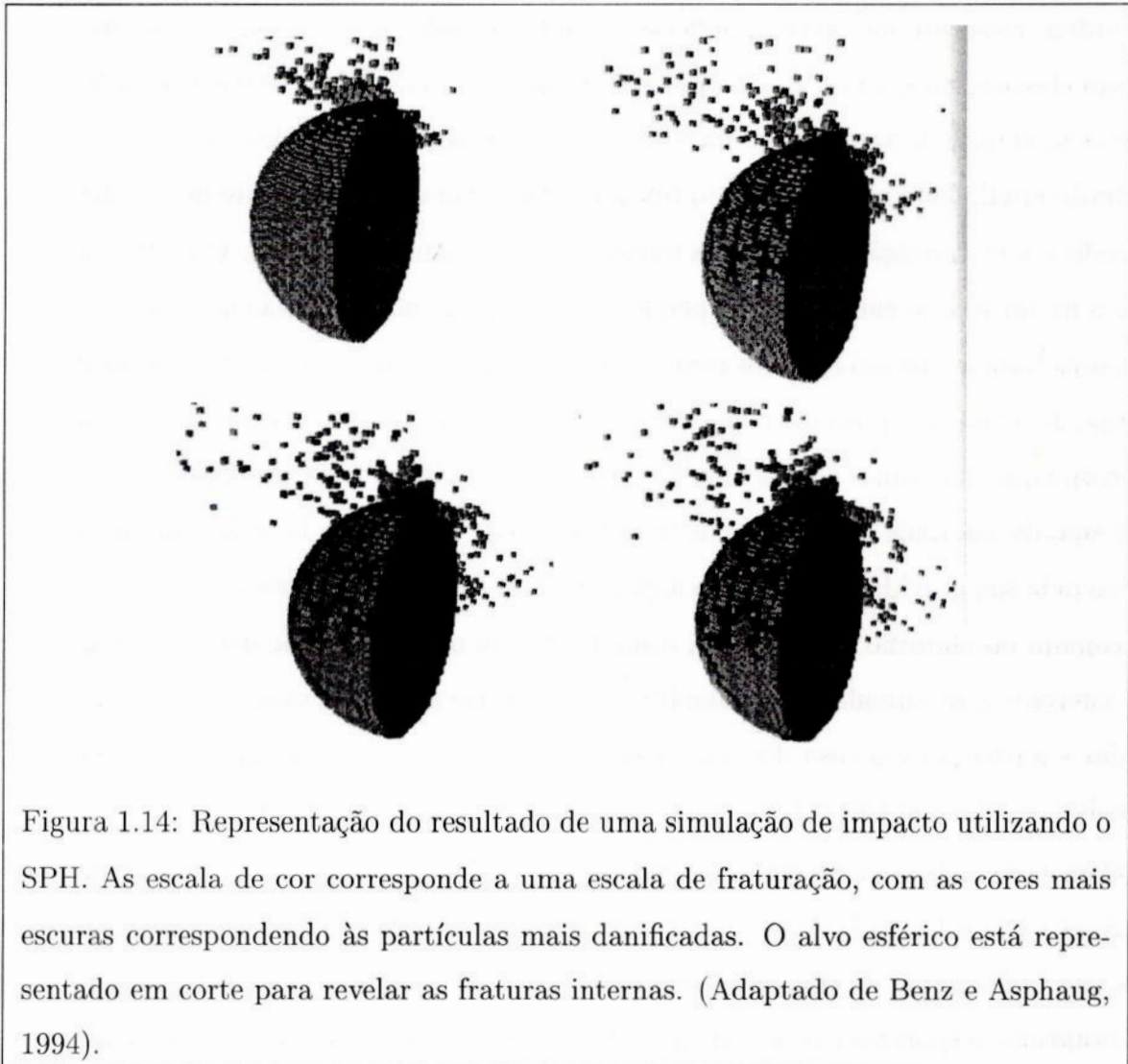


Figura 1.14: Representação do resultado de uma simulação de impacto utilizando o SPH. A escala de cor corresponde a uma escala de fraturação, com as cores mais escuras correspondendo às partículas mais danificadas. O alvo esférico está representado em corte para revelar as fraturas internas. (Adaptado de Benz e Asphaug, 1994).

e distribuição de massa) foram razoavelmente concordantes com o dos experimentos, o que indica que este pode trazer informações razoáveis sobre os asteróides. Até a presente data as aplicações do SPH a asteróides ainda estavam sendo iniciadas, não havendo ainda muitos resultados publicados. Um exemplo de simulação realizada com este modelo está na Figura 1.14.

De uma forma geral, como resultado dos diversos estudos existentes o que se espera de uma colisão de asteróides está representado na Figura 1.15. Com o principal parâmetro determinante do resultado sendo a energia específica, tem-se de uma forma geral que: a baixas velocidades (como na época de formação do Cinturão),

em ordem crescente de energia, poderia ocorrer a simples acreção ou apenas uma colisão elástica, na qual os dois corpos se separam da forma como se encontraram, apenas mudando de velocidade. Para um regime de altas velocidades (como o encontrado atualmente no Cinturão), o resultado seria, em ordem crescente de energia específica, a craterização do alvo ou a fragmentação catastrófica do alvo. O resultado após a fragmentação catastrófica dependeria também da energia: para energias mais baixas os fragmentos são ejetados com velocidade inferior à sua velocidade de escape mútua, de forma que posteriormente a sua atração gravitacional os reúne, formando um corpo que chamamos de reacumulado (conhecido na literatura como *rubble pile*). Este tipo de asteróide constitui-se de um conjunto de fragmentos isolados mantidos juntos pela sua gravidade, e segundo alguns estudos estatísticos (Pravec, 2000) deve ser comum no cinturão. Mas não há atualmente um meio seguro de determinar se um asteróide é reacumulado ou monolítico sem que ele seja observado de perto por sondas - a exceção é o caso dos asteróides de período muito curto, que devem ser monolíticos, pois um corpo reacumulado se desfaria ao girar tão rápido.

Com energia de impacto maior, os fragmentos podem ser ejetados com velocidade próxima à sua velocidade de escape, de forma que muitos deles não se reacumulem, mas que também não se dispersem muito. O resultado é o que se espera que seja o mecanismo responsável pela formação das famílias. Apesar de ser um consenso atualmente que este processo seja o responsável pelas famílias, a falta de modelos de fragmentação colisional faz com que esta explicação seja ainda muito qualitativa, sendo este consenso baseado não em dados que o indiquem de forma precisa, mas principalmente no fato de este ser o único mecanismo razoável conhecido. A verificação desta possibilidade tem sido feita ao tentar usar as informações disponíveis de tamanho e forma para tentar reconstituir os corpos que teriam originado algumas famílias (Gradie et al., 1979, Zappalà et al., 1984), e ao fazer análises mineralógicas dos componentes das famílias, de forma a verificar se sua composição é coerente com uma origem comum.

Finalmente, para as energias mais altas de colisão, os fragmentos são ejetados a

velocidades muito maiores que suas velocidades de escape, se dispersando completamente e não mais sendo possível reconhecer uma família.

Tendo em vista todas estas questões em aberto e a falta de conhecimento de como interagem entre si as colisões, fragmentações e a rotação dos asteróides, desenvolvemos neste trabalho um novo modelo dinâmico para ser aplicado ao estudo da evolução colisional de asteróides.

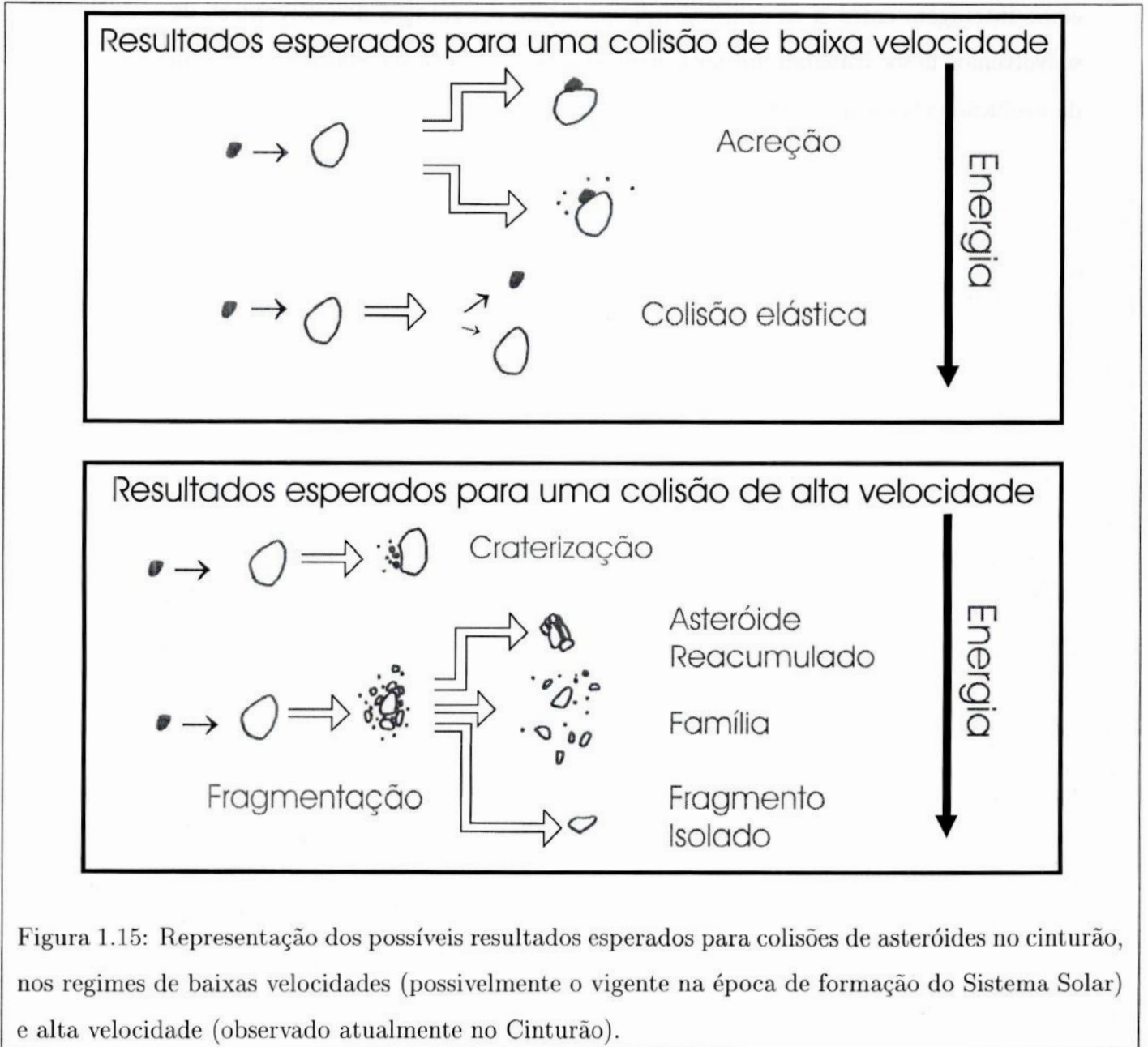


Figura 1.15: Representação dos possíveis resultados esperados para colisões de asteróides no cinturão, nos regimes de baixas velocidades (possivelmente o vigente na época de formação do Sistema Solar) e alta velocidade (observado atualmente no Cinturão).

Capítulo 2

Inventando um asteróide:

Definição do modelo

2.1 Modelando um asteróide reacumulado

Para estudar a fragmentação de asteróides, desenvolvemos um modelo que permita dar uma representação matemática ao nosso sistema físico. Sendo este modelo uma representação razoável da realidade, trabalhando com o seu desenvolvimento matemático deve ser possível simular e obter informações sobre como ocorrem os processos colisionais nos asteróides. Para o desenvolvimento deste modelo, é necessário primeiro estabelecer de forma clara quais hipóteses são assumidas, ou seja, de que forma a realidade física será representada matematicamente. A escolha destas hipóteses foi feita com base em considerações matemáticas e físicas e no que já se conhece dos asteróides. Há que ser considerado também que um modelo muito detalhado é desnecessário, pois para a sua aplicação seriam necessários mais dados que os disponíveis atualmente sobre os asteróides.

As hipóteses nas quais se baseia o nosso modelo são descritas a seguir.

1) Asteróide reacumulado: O asteróide é formado por um conjunto de fragmentos independentes que interagem entre si. O movimento de cada fragmento é determi-

nado, de forma completa (3 dimensões para translação e 3 dimensões para rotação: os 6 graus de liberdade de um corpo rígido em 3 dimensões) através das forças que atuam sobre ele, que se devem apenas à interação com os outros fragmentos.

Uma vez que acredita-se que asteróides reacumulados sejam comuns no cinturão, assim como as colisões, o estudo de fragmentação colisional deste tipo de asteróide é importante para compreender as características atuais do cinturão.

Este modelo é apenas dinâmico, pois considera cada fragmento como um corpo rígido, e trata apenas de seu movimento. O que pode ainda servir de suporte a um modelo mais refinado, que considere a possibilidade de formação de novos fragmentos, através do rompimento dos fragmentos já existentes. Um modelo assim necessitaria também do modelo dinâmico aqui desenvolvido, para descrever o movimento dos fragmentos uma vez que eles tenham se separado.

2) Fragmentos: Os fragmentos são modelados como tendo a forma de um elipsóide triaxial. A forma de cada fragmento é especificada através dos seus 3 semi-eixos principais.

Foi escolhido o elipsóide triaxial por permitir uma representação simples da forma e que está de acordo com o que se conhece atualmente sobre as formas dos asteróides. O mais simples para se trabalhar seria utilizar fragmentos esféricos, mas nós consideramos ser esta uma representação muito precária, pois os fragmentos poderiam diferir apenas no seu tamanho. O uso dos elipsóides permite que eles tenham formas diferentes, o que já torna o modelo mais razoável. Uma descrição mais detalhada de sua forma traria uma enorme complexidade matemática adicional sem trazer um ganho considerável em precisão, pois o que se conhece da forma dos asteróides hoje ainda é muito pouco.

Adicionalmente, é importante lembrar que devido às forças gravitacionais atuantes, quanto maior o asteróide mais próxima a sua forma tem que ser de uma figura de equilíbrio hidrostático: conforme o tamanho aumenta as forças gravitacionais aumentam mais rapidamente que as forças de coesão do material, de forma

que para corpos muito grandes a resistência do material não é capaz de suportar o seu peso, o que faz com que ele assuma uma forma próxima à de equilíbrio. A figura de equilíbrio hidrostático para um fluido girante submetido à sua própria gravidade é um elipsóide de revolução em torno de seu eixo de rotação. Não havendo rotação, a figura de equilíbrio é uma esfera. Quanto maior a rotação maior é a excentricidade do elipsóide (cujo eixo menor é o eixo de rotação), para que a gravidade e a força centrífuga se equilibrem. Tradicionalmente é estimado que as forças gravitacionais comecem a ser dominantes para asteróides a partir de 150Km, mas este valor ainda é bastante discutido.

Para a distribuição de massa dos fragmentos, o mais simples seria utilizar uma densidade constante, o que deve ser válido para corpos monolíticos de composição homogênea. Mas espera-se também uma variação na densidade em função da distância à superfície. Espera-se que haja asteróides diferenciados, que são corpos nos quais houve fusão do seu material, após a qual a gravidade separou os seus componentes. Estes teriam os materiais mais densos (em geral ferro e níquel) no centro, formando um núcleo, e os materiais menos densos (em geral silicatos) na região externa, formando um manto e a crosta. Os asteróides maiores são os mais favorecidos a serem diferenciados, por terem maior gravidade, embora seja importante notar que o único asteróide grande diferenciado conhecido é 4 Vesta, com 468Km de diâmetro, e os dois maiores que ele (1 Ceres, 848Km e 2 Pallas, 498Km) são não diferenciados.

Como resultado de impactos em sua superfície, os asteróides também podem ter uma densidade menor nas proximidades da superfície pela presença de uma camada superficial de regolitos (poeira e pequenos fragmentos), e da presença de fraturas. Outro fator que deve fazer com que a porosidade seja maior na superfície é a sua menor resistência, que faz com que no núcleo seja mais fácil que as porosidades sejam destruídas pela compressão gravitacional.

Para dar alguma liberdade de escolha de como a massa se concentra no núcleo do fragmento, modelamos a densidade como uma distribuição gaussiana. Desta forma, escolhendo a largura da gaussiana é possível escolher o quão rápido a densidade varia

radialmente. Para uma densidade próxima de constante no interior, a gaussiana deve ser estreita (de forma a ser mais próxima de uma função degrau). Para uma variação mais suave da densidade (um corpo diferenciado, por exemplo), a gaussiana seria mais larga. O uso de gaussianas tem ainda as vantagens matemáticas de serem funções analíticas, e serem convenientes para integrações analíticas (desde que as integrais sejam impróprias).

Assim como a hipótese de fragmentos elipsóides, a hipótese de densidade gaussiana deve ser mais razoável para os asteróides maiores.

A densidade de um fragmento i será dada, em um sistema de coordenadas com a mesma origem e alinhado com os eixos principais do elipsóide, por

$$\begin{aligned} \rho_i(\vec{r}) &:= \rho_{i_0} e^{-C(\vec{r}^T E \vec{r})} = \rho_{i_0} e^{-C \begin{pmatrix} x & y & z \end{pmatrix} E \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}} = \\ &= \rho_{i_0} e^{-C \begin{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} \frac{x}{a^2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right) \\ \left(\begin{pmatrix} 0 & \frac{y}{b^2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right) \\ \left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{z}{c^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right) \end{pmatrix}} \\ &= \rho_{i_0} e^{-C \left(\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} \right)} \end{aligned}$$

Com ρ_{i_0} constante (densidade na origem) e C uma constante adimensional que define a largura da gaussiana. E é a matriz que define o elipsóide:

$$E = \begin{pmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{pmatrix}$$

Onde a , b e c são os semi-eixos principais do elipsóide (nos eixos $(x, y$ e z , respectivamente)). É imediato ver que as superfícies de densidade constante são

elipsóides centrados na origem e alinhados com os eixos de referência, com semi-eixos principais a , b e c .

Sobre a notação: Os vetores são associados a matrizes-coluna ($\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$), de forma que os vetores transpostos são associados a matrizes-linha ($\vec{r}^T = \begin{pmatrix} x & y & z \end{pmatrix}$). O que faz com que

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \vec{a}^T \vec{b} = \vec{b} \cdot \vec{a} = \vec{b}^T \vec{a}$$

Generalizando esta expressão para um elipsóide centrado em \vec{r}_i , e girado em relação ao sistema de referência, de tal forma que as coordenadas no sistema com a mesma orientação que o elipsóide (\vec{r}') sejam dadas por $\vec{r}' = A(t)\vec{r}$ (sendo $A(t)$ uma matriz de rotação, que é função do tempo porque a orientação do elipsóide varia no tempo), obtém-se:

$$\rho_i(\vec{r}) := \rho_{i_0} e^{-C(\vec{r}-\vec{r}_i)^T A(t)^T E A(t)(\vec{r}-\vec{r}_i)} \quad (2.1)$$

3) Forças atuantes: São admitidas como forças atuantes sobre os fragmentos apenas a sua atração gravitacional mútua e a sua força de contato. São todas forças que atuam entre pares de fragmentos, e são todas forças conservativas. A inclusão da dissipação de energia é uma possibilidade de refinamento futuro para este modelo, pois um dos principais processos de perda de energia mecânica seria a formação de novos fragmentos. Em colisões reais de alta energia uma parcela significativa da energia deve ser gasta também ao aquecer os asteróides, mas modelar este aquecimento só nos parece ser razoável ao considerar também processos de fragmentação.

Como a obtenção das equações de movimento foi feita utilizando formalismo lagrangeano, é necessário conhecer apenas os potenciais associados às forças atuantes.

Potencial gravitacional: Para a atração gravitacional entre dois fragmentos i, j será utilizado apenas o termo de monopolo do potencial - que corresponde à atração entre duas massas pontuais (ou esfericamente simétricas):

$$V_{G_{i,j}} = -G \frac{M_i M_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.2)$$

Este potencial tem a vantagem de não depender da orientação dos elipsóides, o que simplifica muito o seu uso nas equações de Euler-Lagrange. Uma representação mais elaborada do potencial, incluindo termos de ordem mais alta, quebraria esta degenerescência, fazendo com que o potencial gravitacional dependesse também da orientação mútua dos elipsóides, e tornaria o desenvolvimento das equações de movimento muito mais complexo. E como para os elipsóides de interesse (com baixa excentricidade e baixa massa) o termo dominante no potencial é o de monopolo - quanto mais excêntrico o elipsóide maior a contribuição para o potencial dos termos de ordem mais alta que o monopolo; para esferas apenas o termo de monopolo é não nulo, sendo esta expressão exata - o ganho em precisão seria muito pequeno com relação ao custo adicional que resultaria de utilizar uma representação mais elaborada para o potencial. Melhores aprimoramentos podem ser trazidos ao modelo, com um custo menor, ao alterar outras hipóteses (como incluir fragmentação ou dissipação de energia).

Potencial da força de contato: Modelagem de forças de contato é uma questão bastante complexa. Para que seja razoável, um potencial para a força de contato deve ser constante, ou aproximadamente constante, quando os corpos não estiverem em contato (para que a força seja nula), deve crescer muito rapidamente quando eles entram em contato (para gerar uma força repulsiva forte), e deve ser muito alto para distâncias menores (de forma que eles não se atravessem). O mais imediato com estas características seria pensar em uma barreira vertical infinita. Este tipo de

potencial corresponderia a dois corpos absolutamente rígidos e impenetráveis. Mas este tipo de potencial traz problemas para cálculo numérico, por ser descontínuo, e por gerar forças infinitas. E sabe-se que os corpos reais não são absolutamente rígidos e impenetráveis.

Funções tipo gaussianas poderiam então representar um potencial do tipo desejado. Com uma gaussiana centrada e alinhada com cada corpo, a interseção das gaussianas de dois corpos teria as propriedades desejadas: pico central alto, crescimento rápido quando os corpos estão entrando em contato, e tender a constante quando os corpos não estão muito próximos. Tirando proveito de que a densidade (e, conseqüentemente, a forma) dos fragmentos é definida por gaussianas, criamos então um potencial de contato que é proporcional à quantidade de massa do par de elipsóides que se intercepta:

$$V_{C_{i,j}} := V_0 \int d^3\vec{r} \rho_i(\vec{r}) \rho_j(\vec{r}) \quad (2.3)$$

Esta é a hipótese mais inovadora, e por esta razão a mais discutível inicialmente, no nosso modelo. Depois de desenvolvido e testado o modelo foi possível concluir de forma segura que este potencial é adequado, como será discutido mais adiante. E este potencial tem a grande vantagem matemática de que gaussianas são funções convenientes para se trabalhar analiticamente, simplificando o trabalho.

2.2 Desenvolvimento do Potencial de Contato

É necessário então resolver a integral do potencial da força de contato entre dois fragmentos (i, j) :

$$V_{C_{i,j}} := V_0 \int d^3\vec{r} \rho_i(\vec{r}) \rho_j(\vec{r})$$

Que pode ser escrito como

$$V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \int d^3 \vec{r} e^{-C[(\vec{r}-\vec{r}_i)^T \Lambda_i (\vec{r}-\vec{r}_i) + (\vec{r}-\vec{r}_j)^T \Lambda_j (\vec{r}-\vec{r}_j)]} \quad (2.4)$$

Onde as matrizes Λ_i e Λ_j são as matrizes que definem os elipsóides expressas no sistema de coordenadas fixo. São portanto as matrizes E_i e E_j , que definem os elipsóides no sistema que acompanha a sua rotação, transformadas pelas matrizes de rotação $A_i(t)$ e $A_j(t)$:

$$\Lambda_i := A_i^T(t) E_i A_i(t)$$

Esta integral pode ser resolvida analiticamente apenas se a região de integração for todo o espaço (como é o caso). Expandindo o argumento da exponencial:

$$\begin{aligned} & (\vec{r} - \vec{r}_i)^T \Lambda_i (\vec{r} - \vec{r}_i) + (\vec{r} - \vec{r}_j)^T \Lambda_j (\vec{r} - \vec{r}_j) = \\ & = \vec{r}^T \Lambda_i \vec{r} - 2\vec{r}_i^T \Lambda_i \vec{r} + \vec{r}_i^T \Lambda_i \vec{r}_i + \vec{r}^T \Lambda_j \vec{r} - 2\vec{r}_j^T \Lambda_j \vec{r} + \vec{r}_j^T \Lambda_j \vec{r}_j \end{aligned}$$

Foi usado que $\vec{r}^T \Lambda_i \vec{r}_i = \vec{r}_i^T \Lambda_i \vec{r}$:

$$(\vec{r}^T \Lambda_i \vec{r}_i)^T = \vec{r}_i^T \Lambda_i \vec{r}$$

(Já que $\vec{r}^T \Lambda_i \vec{r}_i$ é um escalar) Assim:

$$\vec{r}_i^T \Lambda_i \vec{r}_i = (\vec{r}^T \Lambda_i \vec{r}_i)^T = \vec{r}_i^T \Lambda_i^T \vec{r} = \vec{r}_i^T \Lambda_i \vec{r}$$

(Já que a matriz Λ_i é simétrica, pois $\Lambda_i^T = (A_i^T(t) E_i A_i(t))^T = A_i^T(t) E_i^T A_i(t) = A_i^T(t) E_i A_i(t) = \Lambda_i$, uma vez que E_i é uma matriz diagonal)

O argumento da exponencial pode então ser expresso como:

$$\begin{aligned} & -C(\vec{r}^T \Lambda_i \vec{r} - 2\vec{r}_i^T \Lambda_i \vec{r} + \vec{r}_i^T \Lambda_i \vec{r}_i + \vec{r}^T \Lambda_j \vec{r} - 2\vec{r}_j^T \Lambda_j \vec{r} + \vec{r}_j^T \Lambda_j \vec{r}_j) \\ & = -C(\vec{r}^T [(\Lambda_i + \Lambda_j) \vec{r}] - 2(\vec{r}_i^T \Lambda_i + \vec{r}_j^T \Lambda_j) \vec{r} + (\vec{r}_i^T \Lambda_i \vec{r}_i + \vec{r}_j^T \Lambda_j \vec{r}_j)) \end{aligned}$$

Assim, pode-se escrever o potencial de uma forma que se assemelha a uma forma quadrática para o argumento da exponencial:

$$V_{C_{i,j}} = V_0 \int d^3\vec{r} \rho_i(\vec{r}) \rho_j(\vec{r}) = V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \int d^3\vec{r} e^{-C(\vec{r}^T \hat{A} \vec{r} + 2\vec{b} \cdot \vec{r} + c)} \quad (2.5)$$

Sendo

$$\hat{A} := \Lambda_i + \Lambda_j$$

$$\vec{b} := -(\Lambda_i \vec{r}_i + \Lambda_j \vec{r}_j)$$

$$c := \vec{r}_i^T \Lambda_i \vec{r}_i + \vec{r}_j^T \Lambda_j \vec{r}_j$$

Este integrando é semelhante a uma gaussiana, deslocada da origem por um vetor \vec{b}' . É mais conveniente resolvê-la ao passar para um sistema de coordenadas com a mesma origem, o que é feito através do vetor

$$\vec{r}' := \vec{r} + \vec{b}'$$

É necessário então completar o argumento da exponencial de forma a obter uma função gaussiana centrada em $\vec{r}' = \vec{0}$. Nesta gaussiana o argumento da exponencial deverá ser

$$\begin{aligned} \vec{r}'^T \hat{A} \vec{r}' &= (\vec{r} + \vec{b}')^T \hat{A} (\vec{r} + \vec{b}') = \vec{r}^T \hat{A} \vec{r} + \vec{b}'^T \hat{A} \vec{r} + \vec{r}^T \hat{A} \vec{b}' + \vec{b}'^T \hat{A} \vec{b}' \\ &\Rightarrow \vec{r}'^T \hat{A} \vec{r}' = \vec{r}^T \hat{A} \vec{r} + 2\vec{r}^T \hat{A} \vec{b}' + \vec{b}'^T \hat{A} \vec{b}' \end{aligned}$$

Onde foi usado que a matriz $\hat{A} = \Lambda_i + \Lambda_j$ é simétrica (uma vez que as Λ são simétricas) e que $\vec{b}'^T \hat{A} \vec{r}'$ é um escalar, de forma a ter $\vec{b}'^T \hat{A} \vec{r}' = \vec{r}'^T \hat{A} \vec{b}'$

Assim, vê-se que o vetor que dá o deslocamento para a integral do potencial é $\vec{b}' = \hat{A}^{-1} \vec{b}$ (onde é usada a notação M^{-1} para indicar a matriz inversa da matriz M). Desta forma,

$$\vec{r}^T \hat{A} \vec{r} = \vec{r}^T \hat{A} \vec{r} + 2\vec{r}^T \vec{b} + \vec{b}^T \hat{A}^{-1} \vec{b},$$

onde foi usado que $(\hat{A}^{-1})^T = (\hat{A}^T)^{-1}$, e que \hat{A} é simétrica, de forma que $(\hat{A}^{-1})^T = \hat{A}^{-1}$.

Assim:

$$\vec{r}^T \hat{A} \vec{r} = (\vec{r}^T \hat{A} \vec{r} + 2\vec{r} \cdot \vec{b} + c) + \vec{b}^T \hat{A}^{-1} \vec{b} - c$$

$$\Rightarrow V_{C_{i,j}} = V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \int d^3 \vec{r} e^{-C(\vec{r}^T \hat{A} \vec{r} + 2\vec{b} \cdot \vec{r} + c)} = V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} e^{C(\vec{b}^T \hat{A}^{-1} \vec{b} - c)} \int d^3 \vec{r} e^{-C(\vec{r}^T \hat{A} \vec{r})}$$

Que é uma integral em todo o espaço de uma gaussiana tridimensional centrada na origem. Esta gaussiana tem uma orientação qualquer, de forma que para resolver esta integral é mais conveniente passar para um sistema de coordenadas girado, que esteja alinhado com a gaussiana. Neste sistema, dado pelo vetor posição $\vec{r}'' = R\vec{r}'$ (com R sendo uma matriz de rotação), a matriz \hat{A} que define a gaussiana passa a ser uma matriz diagonal \hat{E} , dada por $\hat{E} = R\hat{A}R^{-1}$ - a rotação dada por R é definida de forma a ser uma das que diagonalizam \hat{A} .

$$\vec{r}^T \hat{A} \vec{r} = \vec{r}''^T R \hat{A} R^{-1} \vec{r}'' =: \vec{r}''^T \hat{E} \vec{r}''$$

Como R é uma matriz de rotação, é uma matriz ortogonal ($R^{-1} = R^T$).

Efetuada esta mudança de coordenadas na integral, obtém-se então:

$$\int d^3 \vec{r} e^{-C(\vec{r}^T \hat{A} \vec{r})} = \int J(R) d^3 \vec{r}'' e^{-C(\vec{r}''^T \hat{E} \vec{r}'')}$$

Onde $J(R) = \det|R|$ é o jacobiano da transformação dada por R . Como R é uma matriz de rotação, $\det|R| = 1$.

(A notação $\hat{1}_m$ é usada neste texto para indicar a matriz unitária de dimensão m ; Quando for claro pelo contexto, o índice m é omitido).

Assim:

$$\begin{aligned} \int d^3\vec{r}' e^{-C(\vec{r}'^T \hat{A} \vec{r}')} &= \int d^3\vec{r}'' e^{-C(\vec{r}''^T \hat{E} \vec{r}'')} = \int d^3\vec{r}'' e^{-C(\alpha x''^2 + \beta y''^2 + \gamma z''^2)} \\ &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx'' e^{-C\alpha x''^2} \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dy'' e^{-C\beta y''^2} \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dz'' e^{-C\gamma z''^2} \right) \\ \hat{E} &= \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Então resta apenas calcular o valor de uma integral gaussiana simples:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx &=: I \\ \Rightarrow I^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha y^2} dy = \iint e^{-\alpha(x^2+y^2)} dx dy \\ I^2 &= \int_{\theta=0}^{2\pi} \int_{r=0}^{\infty} e^{-\alpha r^2} r dr d\theta = 2\pi \left[-\frac{e^{-\alpha r^2}}{2\alpha} \right]_{r=0}^{\infty} \\ I^2 &= \frac{\pi}{\alpha} \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \end{aligned}$$

Desta forma:

$$\int d^3\vec{r} e^{-C(\vec{r}^T \hat{A} \vec{r} + 2\vec{b} \cdot \vec{r} + c)} = e^{C(\vec{b}^T \hat{A}^{-1} \vec{b} - c)} \sqrt{\frac{C^3 \pi^3}{\alpha \beta \gamma}}$$

Usando que $\det|\hat{E}| = \alpha\beta\gamma$, e que o determinante de uma matriz não muda por rotação, pode-se então expressar o potencial de interação como:

$$V_{C_{i,j}} = V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} e^{C(\vec{b}^T \hat{A}^{-1} \vec{b} - c)} \sqrt{\frac{C^3 \pi^3}{\det|\hat{A}|}}$$

$$(\det|RM| = \det|R|\det|M| = \det|M| \Rightarrow \det|\hat{E}| = \det|\hat{A}|)$$

O termo $(\vec{b}^T \hat{A}^{-1} \vec{b} - c)$ pode ser expresso de uma forma mais conveniente. Substituindo \hat{A} , \vec{b} e c (usando a notação $\frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} := (\Lambda_i + \Lambda_j)^{-1}$):

$$\begin{aligned} \vec{b}^T \hat{A}^{-1} \vec{b} - c &= (\vec{r}_i^T \Lambda_i + \vec{r}_j^T \Lambda_j) \hat{A}^{-1} (\Lambda_i \vec{r}_i + \Lambda_j \vec{r}_j) - \vec{r}_i^T \Lambda_i \vec{r}_i - \vec{r}_j^T \Lambda_j \vec{r}_j \\ &= \vec{r}_i^T \left(\Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_i - \Lambda_i \right) \vec{r}_i + \vec{r}_j^T \left(\Lambda_j \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j - \Lambda_j \right) \vec{r}_j + \vec{r}_i^T \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j \vec{r}_j + \vec{r}_j^T \Lambda_j \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_i \vec{r}_i \end{aligned}$$

Esta expressão pode ser convenientemente simplificada ao expressá-la em termos da matriz $Q_{i,j} := \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j$, pois

$$\begin{aligned} Q_{i,j} &= \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j = \Lambda_i \left[\frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} (\Lambda_i + \Lambda_j) - \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_i \right] = \\ &= \Lambda_i \left[\hat{1} - \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_i \right] = \Lambda_i - \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_i \\ &= \left[\hat{1} - \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \right] \Lambda_i = \left[(\Lambda_i + \Lambda_j) \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} - \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \right] = \\ &= \left[\Lambda_j \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \right] \Lambda_i = Q_{j,i} \\ &= \Lambda_j \left[\frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} (\Lambda_i + \Lambda_j) - \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j \right] = \Lambda_j \left[\hat{1} - \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j \right] = \Lambda_j - \Lambda_j \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j \end{aligned}$$

Assim, obtém-se:

$$\begin{aligned} \vec{b}^T \hat{A}^{-1} \vec{b} - c &= \vec{r}_i^T (-Q_{i,j}) \vec{r}_i + \vec{r}_j^T (-Q_{i,j}) \vec{r}_j + \vec{r}_i^T Q_{i,j} \vec{r}_j + \vec{r}_j^T Q_{i,j} \vec{r}_i = -[(\vec{r}_i^T - \vec{r}_j^T) Q_{i,j} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)] = \\ &= -(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \end{aligned}$$

Finalmente, obtém-se então uma expressão simplificada para o potencial de interação entre os elipsóides i, j :

$$V_{C_{i,j}} = V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \sqrt{\frac{\pi^3}{C^3 \det|\Lambda_i + \Lambda_j|}} e^{-C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (2.6)$$

2.3 Desenvolvimento do lagrangeano do sistema

As equações de movimento serão obtidas a partir do formalismo lagrangeano. Assim, é necessário expressar o lagrangeano do sistema em função de $6N$ variáveis independentes (6 graus de liberdade para cada um dos N elipsóides); as equações de movimento para a variável ξ vêm da equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \xi} = 0$$

Neste sistema o lagrangeano $L = T - V$, com T sendo a energia cinética e V a energia potencial, será formado por quatro termos:

$$L = T - V = T_T + T_R - V_G - V_C$$

Onde os potenciais gravitacional (V_G) e de contato (V_C) são os definidos anteriormente, T_T é a energia cinética de translação e T_R é a energia cinética de rotação.

T_T e V_G não dependem da orientação do elipsóide e é trivial expressá-los em termos do vetor posição do centro de cada elipsóide (\vec{r}_i), que será escolhido como variável para a translação, e sua derivada temporal ($\dot{\vec{r}}$):

$$T_T = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} M_i \dot{\vec{r}}_i^T \dot{\vec{r}}_i =: \sum_{i=1}^N T_{T_i}$$

$$V_G = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left(-\frac{GM_i M_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right) =: \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N V_{G_{i,j}}$$

2.3.1 Rotação

Resta apenas determinar as 3 variáveis independentes para a rotação dos elipsóides e expressar em termos delas e suas derivadas temporais (e de \vec{r}_i e $\dot{\vec{r}}$) os termos T_R e V_C . Como a energia cinética de rotação de cada elipsóide é independente dos outros

e o potencial de contato atua aos pares estes termos serão da forma:

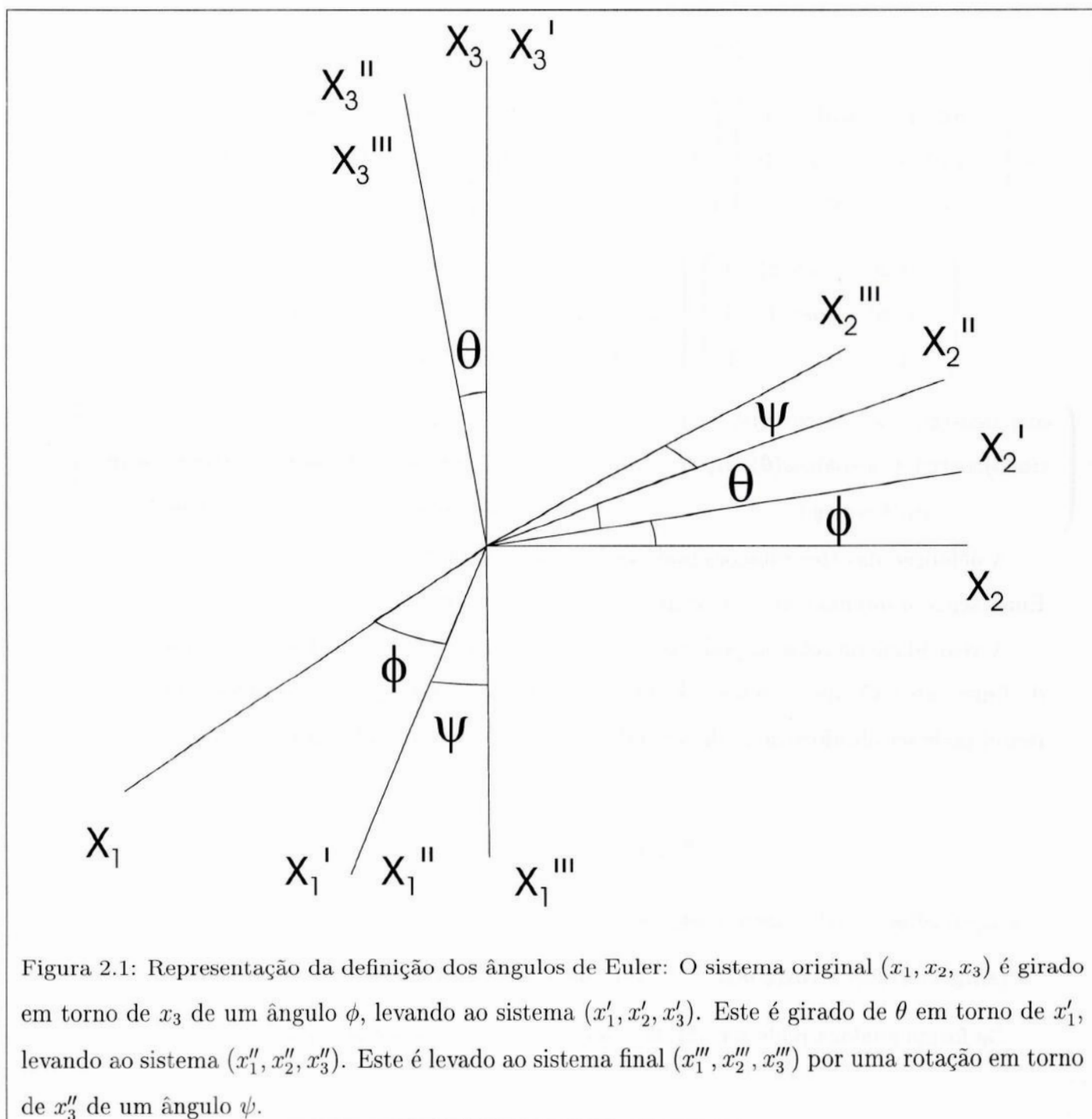
$$T_R =: \sum_{i=1}^N T_{R_i}$$

$$V_C =: \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N V_{C_{i,j}}$$

É um problema bem conhecido na Mecânica Clássica a complexidade inerente ao estudo de rotação de corpos rígidos, não havendo uma forma simples de se representar e trabalhar com rotações gerais, sem a imposição de restrições que simplifiquem o problema, como eixo de rotação fixo ou ausência de torques. Esta é a parte mais complexa do desenvolvimento deste modelo, e a mais custosa computacionalmente ao executar os cálculos.

A representação mais conhecida para rotação é a dos ângulos de Euler. A rotação é feita através de 3 rotações sucessivas, como indicado na Figura 2.1: a primeira (ângulo ϕ) em torno do eixo z ; a segunda (ângulo θ) em torno do novo eixo $x =: \zeta_1$, e a terceira (ângulo ψ) em torno do novo eixo $z =: \zeta_3$. A rotação resultante é expressa por:

$$\begin{aligned} \vec{r}^j &= R\vec{r} = R_z(\psi)R_x(\theta)R_z(\phi)\vec{r} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\psi) & \sin(\psi) & 0 \\ -\sin(\psi) & \cos(\psi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ 0 & -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) & 0 \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \vec{r} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\psi) & \sin(\psi) & 0 \\ -\sin(\psi) & \cos(\psi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) & 0 \\ -\cos(\theta)\sin(\phi) & \cos(\theta)\cos(\phi) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta)\sin(\phi) & -\sin(\theta)\cos(\phi) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \vec{r} \\ \Rightarrow \vec{r}^j &= \begin{pmatrix} \cos(\psi)\cos(\phi) - \sin(\psi)\cos(\theta)\sin(\phi) & \cos(\psi)\sin(\phi) + \sin(\psi)\cos(\theta)\cos(\phi) & \sin(\psi)\sin(\theta) \\ -\sin(\psi)\cos(\phi) - \cos(\psi)\cos(\theta)\sin(\phi) & -\sin(\psi)\sin(\phi) + \cos(\psi)\cos(\theta)\cos(\phi) & \cos(\psi)\sin(\theta) \\ \sin(\theta)\sin(\phi) & -\sin(\theta)\cos(\phi) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \vec{r} \end{aligned}$$



A transformação inversa pode ser obtida de forma análoga:

$$\begin{aligned}
 \vec{r} &= R\vec{r}' = R_z(-\phi)R_x(-\theta)R_z(-\psi)\vec{r}' \\
 &= \begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) & 0 \\ +\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ 0 & \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\psi) & -\sin(\psi) & 0 \\ \sin(\psi) & \cos(\psi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \vec{r}' \\
 &= \begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) & 0 \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\psi) & -\sin(\psi) & 0 \\ \cos(\theta)\sin(\psi) & \cos(\theta)\cos(\psi) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta)\sin(\psi) & \sin(\theta)\cos(\psi) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \vec{r}' \\
 \Rightarrow \vec{r} &= \begin{pmatrix} \cos(\phi)\cos(\psi) - \sin(\phi)\cos(\theta)\sin(\psi) & -\cos(\phi)\sin(\psi) - \sin(\phi)\cos(\theta)\cos(\psi) & \sin(\phi)\sin(\theta) \\ \sin(\phi)\cos(\psi) + \cos(\phi)\cos(\theta)\sin(\psi) & -\sin(\phi)\sin(\psi) + \cos(\phi)\cos(\theta)\cos(\psi) & -\cos(\phi)\sin(\theta) \\ \sin(\theta)\sin(\psi) & \sin(\theta)\cos(\psi) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \vec{r}'
 \end{aligned}$$

A definição das três rotações pode variar, mas qualquer definição dos ângulos de Euler segue o mesmo conceito de três rotações sucessivas.

A velocidade de rotação pode ser expressa em termos das derivadas dos ângulos de Euler, uma vez que o vetor velocidade de rotação $\vec{\omega}'$ ($\vec{\omega}$ expresso no sistema girante) pode ser obtido através da soma das componentes resultantes de cada rotação:

$$\begin{aligned}
 \vec{\omega}' &= \dot{\phi}\hat{z} + \dot{\theta}\hat{\zeta}_1 + \dot{\psi}\hat{\zeta}_3 \\
 &= \dot{\phi}(\sin(\theta)\sin(\psi)\hat{x}' + \sin(\theta)\cos(\psi)\hat{y}' + \cos(\theta)\hat{z}') + \dot{\theta}(\cos(\psi)\hat{x}' - \sin(\psi)\hat{y}') + \dot{\psi}\hat{z}' \\
 &= (\sin(\theta)\sin(\psi)\dot{\phi} + \cos(\psi)\dot{\theta})\hat{x}' + (-\sin(\psi)\dot{\theta} + \sin(\theta)\cos(\psi)\dot{\phi})\hat{y}' + (\dot{\psi} + \cos(\theta)\dot{\phi})\hat{z}'
 \end{aligned}$$

De forma análoga pode ser obtida velocidade de rotação no sistema fixo:

$$\begin{aligned}
 \vec{\omega} &= \dot{\phi}\hat{z} + \dot{\theta}\hat{\zeta}_1 + \dot{\psi}\hat{\zeta}_3 \\
 &= \dot{\psi}(\sin(\theta)\sin(\phi)\hat{x} - \sin(\theta)\cos(\phi)\hat{y} + \cos(\theta)\hat{z}) + \dot{\theta}(\cos(\phi)\hat{x} + \sin(\phi)\hat{y}) + \dot{\phi}\hat{z}
 \end{aligned}$$

$$= (\sin(\theta)\sin(\phi)\dot{\psi} + \cos(\phi)\dot{\theta})\hat{x} + (\sin(\phi)\dot{\theta} - \sin(\theta)\cos(\phi)\dot{\psi})\hat{y} + (\dot{\phi} + \cos(\theta)\dot{\psi})\hat{z}$$

O maior problema associado aos ângulos de Euler está na ocorrência de indeterminações em suas definições: se a segunda rotação for nula ($\theta = 0$), as outras duas se degeneram, pois são em torno do mesmo eixo (z), e ocorrem em seguida, de forma que ficam indeterminados os valores de ψ e ϕ (apenas a sua soma é definida). Esta indeterminação leva ainda à ocorrência de singularidades nas equações de movimento expressas em função dos ângulos de Euler.

2.3.2 Quatérnions

Para descrever a rotação neste trabalho é usada a álgebra de quatérnions. Introduzidos por Sir W.R. Hamilton em 1866, os quatérnions apresentam menos problemas de indefinições e singularidades ao representar as rotações. O uso para representação de rotação por quatérnions não é tão divulgado ou intuitivo como os ângulos de Euler, mas tem a vantagem de ser matematicamente conveniente para a Mecânica Analítica.

Representações para os quatérnions

Um quatérnion (\vec{q} ou q) é um objeto formado por quatro componentes reais independentes. As notações mais comuns (várias delas serão utilizadas neste texto) para seu uso são:

· Vetorial / matricial:

$$q = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{q} \\ q_4 \end{pmatrix}$$

(Onde \vec{q} é um vetor tridimensional, de componentes q_1, q_2, q_3).

· Par ordenado:

$$\tilde{q} = (q_4, \vec{q})$$

· Forma complexa:

$$\tilde{q} = q_4 \hat{1} + i\vec{q} \cdot \vec{\sigma}$$

Onde $\vec{\sigma}$ é o vetor formado pelas matrizes de Pauli:

$$\vec{\sigma} := \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Adicionalmente, para a definição da álgebra dos quatérnions é definido o seu produto; para dois quatérnions genéricos \tilde{a} e \tilde{b} o seu produto, o quatérnion $\tilde{a}\tilde{b}$ é definido a partir da notação complexa:

$$\begin{aligned} \tilde{a}\tilde{b} &:= (a_4 \hat{1} + i\vec{a} \cdot \vec{\sigma})(b_4 \hat{1} + i\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) \\ &= a_4 \hat{1} b_4 \hat{1} + a_4 \hat{1} i\vec{b} \cdot \vec{\sigma} + i\vec{a} \cdot \vec{\sigma} b_4 \hat{1} + i\vec{a} \cdot \vec{\sigma} i\vec{b} \cdot \vec{\sigma} \end{aligned}$$

$$= a_4 b_4 \hat{1} + i(a_4 \vec{b} \cdot \vec{\sigma} + b_4 \vec{a} \cdot \vec{\sigma}) - (\vec{a} \cdot \sigma)(\vec{b} \cdot \vec{\sigma})$$

Expandindo $(\vec{a} \cdot \sigma)(\vec{b} \cdot \vec{\sigma})$:

$$\begin{aligned} (\vec{a} \cdot \sigma)(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) &= (a_1 \sigma_1 + a_2 \sigma_2 + a_3 \sigma_3)(b_1 \sigma_1 + b_2 \sigma_2 + b_3 \sigma_3) = \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_3 & b_1 - ib_2 \\ b_1 + ib_2 & -b_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_3 b_3 + (a_1 - ia_2)(b_1 + ib_2) & a_3(b_1 - ib_2) - (a_1 - ia_2)b_3 \\ (a_1 + ia_2)b_3 - a_3(b_1 + ib_2) & (a_1 + ia_2)(b_1 - ib_2) + a_3 b_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 + i(a_1 b_2 - a_2 b_1) & a_3 b_1 - a_1 b_3 + i(a_2 b_3 - a_3 b_2) \\ a_1 b_3 - a_3 b_1 + i(a_2 b_3 - a_3 b_2) & a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 + i(a_2 b_1 - a_1 b_2) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \vec{a} \cdot \vec{b} + i(\vec{a} \times \vec{b})_3 & (\vec{a} \times \vec{b})_2 + i(\vec{a} \times \vec{b})_1 \\ -(\vec{a} \times \vec{b})_2 + i(\vec{a} \times \vec{b})_1 & \vec{a} \cdot \vec{b} - i(\vec{a} \times \vec{b})_3 \end{pmatrix} = \\ &= \vec{a} \cdot \vec{b} \hat{1} + i \begin{pmatrix} (\vec{a} \times \vec{b})_3 & -i(\vec{a} \times \vec{b})_2 + (\vec{a} \times \vec{b})_1 \\ i(\vec{a} \times \vec{b})_2 + (\vec{a} \times \vec{b})_1 & -(\vec{a} \times \vec{b})_3 \end{pmatrix} \\ &= \vec{a} \cdot \vec{b} \hat{1} + i(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{\sigma} \end{aligned}$$

Assim, voltando à definição do produto dos quatérnions:

$$\begin{aligned} \tilde{a}\tilde{b} &= a_4 b_4 \hat{1} + i(a_4 \vec{b} \cdot \vec{\sigma} + b_4 \vec{a} \cdot \vec{\sigma}) - (\vec{a} \cdot \vec{b} \hat{1} + i(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{\sigma}) \\ \Rightarrow \tilde{a}\tilde{b} &= (a_4 b_4 - \vec{a} \cdot \vec{b}) \hat{1} + i(a_4 \vec{b} + b_4 \vec{a} - (\vec{a} \times \vec{b})) \cdot \vec{\sigma} \end{aligned}$$

Desta forma, $\tilde{a}\tilde{b}$ é um quatérnion formado pelos elementos

$$ab_4 = a_4 b_4 - \vec{a} \cdot \vec{b}$$

$$\vec{a}\vec{b} = a_4 \vec{b} + b_4 \vec{a} - (\vec{a} \times \vec{b})$$

A possibilidade de uso dos quatérnions para representação de rotação vem do fato de os quatérnions e a operação de multiplicação acima definida formarem um

grupo $SU(2)$ (transformações da matriz unitária 2×2), que é isomorfo ao grupo $O(3)$ formado pelas rotações em 3 dimensões.

Para estabelecer esta representação vamos inicialmente expressar o vetor \vec{r}' resultante da rotação do vetor \vec{r} de um ângulo θ em torno do eixo dado pelo vetor unitário \hat{n} (o sentido da rotação segue a definição destrógira usual). A rotação pode ser expressa por:

$$\begin{aligned}\vec{r}' &= (\vec{r} \cdot \hat{n})\hat{n} + \sin(\theta)(\hat{n} \times \vec{r}) + \cos(\theta)(\vec{r} - (\vec{r} \cdot \hat{n})\hat{n}) \\ &= \vec{r}\cos(\theta) + (\hat{n} \cdot \vec{r})(1 - \cos(\theta))\hat{n} + \sin(\theta)(\hat{n} \times \vec{r}) \\ &= (2\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - 1)\vec{r} + 2\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)(\hat{n} \cdot \vec{r})\hat{n} + 2\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)(\hat{n} \times \vec{r})\end{aligned}$$

O que sugere a definição do quatérnion \tilde{q} que será utilizado para representar esta rotação:

$$\begin{aligned}\vec{q} &:= \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\hat{n} \\ q_4 &:= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\end{aligned}$$

Que é um quatérnion normalizado ($|\tilde{q}|^2 = |q_1|^2 + |q_2|^2 + |q_3|^2 + |q_4|^2 = 1$), com sua componente vetorial na direção de \hat{n} , e formado apenas por componentes reais (de forma que $|q_i|^2 = q_i^2$ e $|\tilde{q}|^2 = \tilde{q}^2$) A normalização impõe o vínculo necessário para que haja apenas 3 variáveis reais independentes.

O que leva a

$$\vec{r}' = (2q_4^2 - 1)\vec{r} + 2(\vec{q} \cdot \vec{r})\vec{q} + 2q_4(\vec{q} \times \vec{r})$$

O que pode ser obtido a partir do produto de quatérnions; definindo o quatérnion $\tilde{r} := (0, \vec{r})$, sendo $\tilde{q}^{-1} = (q_4, -\vec{q})$ o quatérnion inverso de \tilde{q} , obtém-se:

$$\tilde{q}^{-1}\tilde{r}\tilde{q} = \tilde{q}^{-1}(-\vec{r} \cdot \vec{q}, q_4\vec{r} - (\vec{r} \times \vec{q}))$$

$$\begin{aligned}
&= (-q_4 \vec{r} \cdot \vec{q} + \vec{q} \cdot (q_4 \vec{r} - (\vec{r} \times \vec{q})), q_4 (q_4 \vec{r} - (\vec{r} \times \vec{q})) + \vec{r} \cdot \vec{q} \vec{q} + (\vec{q} \times (q_4 \vec{r} - (\vec{r} \times \vec{q}))) \\
&= (0, q_4^2 \vec{r} + 2q_4 \vec{q} \times \vec{r} + \vec{r} \cdot \vec{q} \vec{q} - (q_4^2 \vec{r} - \vec{q} \cdot \vec{r} \vec{q})) = (0, (q_4^2 - \vec{q}^2) \vec{r} + 2\vec{q} \cdot \vec{r} \vec{q} + 2q_4 \vec{q} \times \vec{r}) \\
&= (0, (2q_4^2 - 1) \vec{r} + 2\vec{q} \cdot \vec{r} \vec{q} + 2q_4 \vec{q} \times \vec{r}) \\
&\Rightarrow \vec{q}^{-1} \vec{r} \vec{q} = (0, \vec{r}') =: \vec{r}'
\end{aligned}$$

$\vec{q} \times (\vec{r} \times \vec{q}) = q^2 \vec{r} - \vec{q} \cdot \vec{r} \vec{q}$, pois para quaisquer vetores \vec{a} , \vec{b} e \vec{c} :

$$\begin{aligned}
\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) &= a_i (\vec{b} \times \vec{c})_j \epsilon_{i,j,k} \hat{e}_k = a_i (b_l c_m \epsilon_{l,m,j}) \epsilon_{i,j,k} \hat{e}_k \\
&= a_i b_l c_m \epsilon_{l,m,j} \epsilon_{k,i,j} = a_i b_l c_m \hat{e}_k (\delta_{l,k} \delta_{m,i} - \delta_{l,i} \delta_{m,k}) = a_i b_k c_i \hat{e}_k - a_i b_i c_k \hat{e}_k \\
&\Rightarrow \vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c}) \vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b}) \vec{c}
\end{aligned}$$

O quatérnio $\vec{q}^{-1} = (q_4, -\vec{q})$ foi chamado quatérnio inverso de \vec{q} devido ao seu produto corresponder ao quatérnio de uma identidade (rotação nula: $\theta = 0$):

$$\vec{q}^{-1} \vec{q} = (q_4 q_4 + \vec{q} \cdot \vec{q}, q_4 \vec{q} - q_4 \vec{q} + (\vec{q} \times \vec{q})) = (1, \vec{0})$$

Como a rotação inversa à dada pelo quatérnio $\vec{q} = (\cos(\frac{\theta}{2}), \sin(\frac{\theta}{2}) \hat{n})$ corresponde à troca de sinal do ângulo θ , ou à troca do sinal do vetor \hat{n} , o quatérnio inverso $\vec{q}^{-1} = (\cos(\frac{\theta}{2}), -\sin(\frac{\theta}{2}) \hat{n})$ corresponde, portanto, à rotação inversa à de \vec{q} .

(Onde foram usados:

Convenção de Einstein (somatório implícito de 1 a 3 nos índices que se repetem):

$$a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3;$$

$\delta_{i,j} = \delta_{j,i}$ é a delta de Krönecker ($\delta_{i,j} = 0, i \neq j; \delta_{i,j} = 1, i = j$); desta forma,

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 = a_i b_j \delta_{i,j} = a_j b_j$$

$\epsilon_{i,j,k} = \epsilon_{k,i,j} = \epsilon_{j,k,i} = -\epsilon_{i,k,j} = -\epsilon_{j,i,k} = -\epsilon_{k,j,i}$ é o símbolo de Levi-Civita ($\epsilon_{1,2,3} = 1$;

$\epsilon_{i,j,k} = 0$ para $i = j$, ou $i = k$, ou $j = k$); é definido de forma a ter $\vec{a} \times \vec{b} = a_i b_j \epsilon_{i,j,k} \hat{e}_k$

- com \hat{e}_k sendo o vetor da base (ortonormal) na direção k (i, j, k valem 1,2 ou 3).

$a_i b_l c_m \epsilon_{l,m,j} \epsilon_{k,i,j} = a_i b_l c_m \hat{e}_k (\delta_{l,k} \delta_{m,i} - \delta_{l,i} \delta_{m,k})$, pois ao somar em i, j, k, l, m para que $\epsilon_{l,m,j} \epsilon_{k,i,j}$ não se anule é necessário ter $l \neq m, l \neq j, m \neq j, k \neq i, k \neq j, i \neq j$, de

forma que apenas são não nulos os termos com $l = k, m = i$ (o que torna $\epsilon_{l,m,j} = \epsilon_{k,i,j}$,

de forma que o seu produto vale 1) e $l = i, k = m$ (o que torna $\epsilon_{l,m,j} = -\epsilon_{k,i,j}$, de forma que seu produto vale -1).

Por outro lado, como o vetor girado \vec{r}' pode também ser obtido pela multiplicação de uma matriz de rotação R pelo vetor \vec{r} , a matriz de rotação expressa em função de \vec{q} pode ser obtida ao escrever a expressão para $\vec{r}'(\vec{r}, \vec{q})$ como o produto de uma matriz por \vec{r} :

$$\vec{r}' = (2q_4^2 - 1)\vec{r} + 2\vec{q}(\vec{q} \cdot \vec{r}) + 2q_4(\vec{q} \times \vec{r}) = (2q_4^2 - 1)\hat{1}\vec{r} + 2\vec{q}(\vec{q}^T \vec{r}) + 2q_4(\vec{q} \times \vec{r})$$

Para obter a matriz de rotação resta apenas encontrar uma matriz V tal que o seu produto por um vetor qualquer \vec{b} expresse o seu produto vetorial por um vetor qualquer \vec{a} ($M\vec{b} = \vec{a} \times \vec{b}$).

Usando que

$$\vec{a} \times \vec{b} = \begin{pmatrix} a_2b_3 - a_3b_2 \\ a_3b_1 - a_1b_3 \\ a_1b_2 - a_2b_1 \end{pmatrix}$$

E que

$$M\vec{b} = \begin{pmatrix} M_{1,1}b_1 + M_{1,2}b_2 + M_{1,3}b_3 \\ M_{2,1}b_1 + M_{2,2}b_2 + M_{2,3}b_3 \\ M_{3,1}b_1 + M_{3,2}b_2 + M_{3,3}b_3 \end{pmatrix}$$

Obtém-se, ao igualar estas duas expressões:

$$M = \begin{pmatrix} 0 & -a_3 & a_2 \\ a_3 & 0 & -a_1 \\ -a_2 & a_1 & 0 \end{pmatrix} = a_1 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + a_3 \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

O que sugere definir

$$\Sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Sigma_2 := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \Sigma_3 := \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

De forma a ter

$$\vec{a} \times \vec{b} = (a_1 \Sigma_1 + a_2 \Sigma_2 + a_3 \Sigma_3) \vec{b} = (\vec{a} \cdot \vec{\Sigma}) \vec{b} = M \vec{b}$$

O vetor $\vec{\Sigma} := \begin{pmatrix} \Sigma_1 \\ \Sigma_2 \\ \Sigma_3 \end{pmatrix}$ permite então obter o produto vetorial $\vec{a} \times \vec{b}$ a partir do

produto com a matriz $M = (\vec{a} \cdot \vec{\Sigma})$.

Com o uso deste resultado é possível obter a matriz de rotação a partir dos quatérnions:

$$\begin{aligned} \vec{r}' &= (2q_4^2 - 1)\vec{r} + 2\vec{q}(\vec{q} \cdot \vec{r}) + 2q_4(\vec{q} \times \vec{r}) = (2q_4^2 - 1)\hat{1}\vec{r} + 2\vec{q}\vec{q}^T \vec{r} + 2q_4\vec{q} \cdot \vec{\Sigma} \vec{r} \\ &= ((2q_4^2 - 1)\hat{1} + 2\vec{q}\vec{q}^T + 2q_4\vec{q} \cdot \vec{\Sigma})\vec{r} = R\vec{r} \\ &\Rightarrow R = (2q_4^2 - 1)\hat{1} + 2\vec{q}\vec{q}^T + 2q_4\vec{q} \cdot \vec{\Sigma} \\ &= 2 \begin{pmatrix} q_4^2 - \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & q_4^2 - \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & q_4^2 - \frac{1}{2} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} q_1^2 & q_1q_2 & q_1q_3 \\ q_2q_1 & q_2^2 & q_2q_3 \\ q_3q_1 & q_3q_2 & q_3^2 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} 0 & -q_4q_3 & q_4q_2 \\ q_4q_3 & 0 & -q_4q_1 \\ -q_4q_2 & q_4q_1 & 0 \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow R = 2 \begin{pmatrix} q_1^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} & q_1q_2 - q_3q_4 & q_1q_3 + q_2q_4 \\ q_1q_2 + q_3q_4 & q_2^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} & q_2q_3 - q_1q_4 \\ q_1q_3 - q_2q_4 & q_2q_3 + q_1q_4 & q_3^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Esta expressão para a matriz de rotação, que tem a vantagem de não utilizar funções trigonométricas, permite que o potencial da força de contato seja expresso em função dos quatérnions, pois a sua dependência com a rotação está apenas nas matrizes $A_i(t)$.

Desenvolvimento da energia cinética de rotação

Para completar o lagrangeano, resta apenas encontrar uma expressão para a energia cinética de rotação em função dos quatérnions e suas derivadas temporais (a energia cinética de rotação independe da translação).

A energia cinética de rotação para cada corpo pode ser expressa por

$$T_{R_i} = \frac{1}{2} \vec{\omega}_i^T I_i \vec{\omega}_i = \frac{1}{2} \vec{\omega}'_i{}^T I'_i \vec{\omega}'_i$$

Onde $\vec{\omega}_i$ é o vetor velocidade de rotação e I_i a matriz de inércia, ambos definidos no sistema fixo, e $\vec{\omega}'_i$ e I'_i são as mesmas quantidades, expressas no sistema de coordenadas intrínseco ao corpo. No sistema intrínseco, os momentos de inércia são constantes (pois o corpo é rígido), enquanto no sistema fixo os momentos de inércia variam conforme o corpo gira, pois se referem aos eixos fixos. Por este motivo, a energia cinética de rotação a ser utilizada será expressa em função das variáveis do sistema que acompanha o elipsóide. Este sistema é escolhido de forma a ter seus eixos alinhados com os eixos de simetria do elipsóide, para que a matriz de inércia seja diagonal:

$$I'_i = \begin{pmatrix} \eta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_2 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_3 \end{pmatrix}$$

De forma que η_j seja o momento de inércia em torno do eixo j . Calculando o momento de inércia em torno do eixo z' :

$$\begin{aligned} \eta_3 &= \int \int \int \rho_{i_0} e^{-C \left(\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} + \frac{z'^2}{c^2} \right)} (x'^2 + y'^2) dx' dy' dz' \\ &= \rho_{i_0} \left(\int e^{-C \left(\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} \right)} (x'^2 + y'^2) dx' dy' \right) \left(\int e^{-C \left(\frac{z'^2}{c^2} \right)} dz' \right) \end{aligned}$$

$$= \rho_{i_0} c \sqrt{\frac{\pi}{C}} \left[\left(\int e^{-C \left(\frac{x'^2}{a^2} \right)} x'^2 dx' \right) \left(\int e^{-C \left(\frac{y'^2}{b^2} \right)} dy' \right) + \left(\int e^{-C \left(\frac{y'^2}{b^2} \right)} y'^2 dy' \right) \left(\int e^{-C \left(\frac{x'^2}{a^2} \right)} dx' \right) \right]$$

A integral $\int e^{-C \left(\frac{x'^2}{a^2} \right)} x'^2 dx'$ pode ser resolvida usando que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left(e^{-C \frac{x^2}{a^2}} x \right) &= \left(\frac{-2Cx}{a^2} x \right) e^{-C \frac{x^2}{a^2}} + e^{-C \frac{x^2}{a^2}} = e^{-C \frac{x^2}{a^2}} \left(1 - \frac{2C}{a^2} x^2 \right) \\ \Rightarrow e^{-C \frac{x^2}{a^2}} x^2 &= \left[\frac{d}{dx} \left(e^{-C \frac{x^2}{a^2}} x \right) - e^{-C \frac{x^2}{a^2}} \right] \left(\frac{-a^2}{2C} \right) \end{aligned}$$

Assim:

$$\begin{aligned} \int e^{-C \left(\frac{x'^2}{a^2} \right)} x'^2 dx' &= \frac{-a^2}{2C} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} \left(e^{-C \frac{x^2}{a^2}} x \right) dx - \int_{-\infty}^{\infty} e^{-C \frac{x^2}{a^2}} dx \right) \\ &= \frac{-a^2}{2C} \left[\left(x e^{-C \frac{x^2}{a^2}} \right)_{-\infty}^{\infty} - a \sqrt{\frac{\pi}{C}} \right] = \frac{1}{2} a^3 \sqrt{\frac{\pi}{C^3}} \end{aligned}$$

O que leva a

$$\begin{aligned} \eta_3 &= \rho_{i_0} c \sqrt{\frac{\pi}{C}} \left(a \sqrt{\frac{\pi}{C}} \int e^{-C \frac{y'^2}{b^2}} y'^2 dy' + b \sqrt{\frac{\pi}{C}} \int e^{-C \frac{x'^2}{a^2}} x'^2 dx' \right) \\ \Rightarrow \eta_3 &= \rho_{i_0} c \frac{\pi}{C} \left(a \frac{b^3 \sqrt{\pi}}{2\sqrt{C^3}} + b \frac{a^3 \sqrt{\pi}}{2\sqrt{C^3}} \right) = \rho_{i_0} abc \frac{\pi^{3/2}}{2C^{5/2}} (b^2 + a^2) \end{aligned}$$

Como a integral da densidade em todo o espaço deve ser a massa do elipsóide, há um vínculo entre ρ_{i_0} , M_i e C . Que pode ser obtido a partir de

$$\begin{aligned} M_i &= \int \rho(\vec{r}') d^3 \vec{r}' = \rho_{i_0} \int \int \int e^{-C \left(\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} + \frac{z'^2}{c^2} \right)} dx' dy' dz' \\ &= \rho_{i_0} \left(\int e^{-C \frac{x'^2}{a^2}} dx' \right) \left(\int e^{-C \frac{y'^2}{b^2}} dy' \right) \left(\int e^{-C \frac{z'^2}{c^2}} dz' \right) \\ &= \rho_{i_0} abc \sqrt{\frac{\pi^3}{C^3}} \Rightarrow \rho_{i_0} = \frac{M_i}{abc} \sqrt{\frac{C^3}{\pi^3}} \end{aligned}$$

Assim:

$$\eta_3 = \frac{M_i (a^2 + b^2)}{C} \frac{1}{2}$$

É imediato então obter os momentos de inércia dos outros eixos:

$$\eta_2 = \frac{M_i (a^2 + c^2)}{C} \frac{1}{2}$$

$$\eta_1 = \frac{M_i (b^2 + c^2)}{C} \frac{1}{2}$$

Resta então encontrar uma expressão para a velocidade angular $\vec{\omega}'$ em função dos quatérnions. O que será feito usando a relação entre a matriz de rotação $A_i(t)$ e o vetor velocidade angular $\vec{\omega}' \times A = \frac{d}{dt}A = \dot{A}$ (para abreviar a notação, será utilizado A no lugar de $A_i(t)$):

$$\dot{A} = \vec{\omega}' \times A = \vec{\omega}' \cdot \vec{\Sigma} A \Rightarrow \vec{\omega}' \cdot \vec{\Sigma} = \dot{A} A^{-1} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -\omega'_3 & \omega'_2 \\ \omega'_3 & 0 & -\omega'_1 \\ -\omega'_2 & \omega'_1 & 0 \end{pmatrix} = \dot{A} A^T$$

\dot{A} e A^T vêm da expressão para A em função dos quatérnions:

$$\begin{aligned} \dot{A} &= \frac{d}{dt} 2 \begin{pmatrix} q_1^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} & q_1 q_2 - q_3 q_4 & q_1 q_3 + q_2 q_4 \\ q_1 q_2 + q_3 q_4 & q_2^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} & q_2 q_3 - q_1 q_4 \\ q_1 q_3 - q_2 q_4 & q_2 q_3 + q_1 q_4 & q_3^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ &= 2 \begin{pmatrix} 2q_1 \dot{q}_1 + 2q_4 \dot{q}_4 & \dot{q}_1 q_2 + q_1 \dot{q}_2 - \dot{q}_3 q_4 - q_3 \dot{q}_4 & \dot{q}_1 q_3 + q_1 \dot{q}_3 + \dot{q}_2 q_4 + q_2 \dot{q}_4 \\ \dot{q}_1 q_2 + q_1 \dot{q}_2 + \dot{q}_3 q_4 + q_3 \dot{q}_4 & 2q_2 \dot{q}_2 + 2q_4 \dot{q}_4 & \dot{q}_2 q_3 + q_2 \dot{q}_3 - \dot{q}_1 q_4 - q_1 \dot{q}_4 \\ \dot{q}_1 q_3 + q_1 \dot{q}_3 - \dot{q}_2 q_4 - q_2 \dot{q}_4 & \dot{q}_2 q_3 + q_2 \dot{q}_3 + \dot{q}_1 q_4 + q_1 \dot{q}_4 & 2q_3 \dot{q}_3 + 2q_4 \dot{q}_4 \end{pmatrix} \\ A^T &= 2 \begin{pmatrix} q_1^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} & q_1 q_2 - q_3 q_4 & q_1 q_3 + q_2 q_4 \\ q_1 q_2 + q_3 q_4 & q_2^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} & q_2 q_3 - q_1 q_4 \\ q_1 q_3 - q_2 q_4 & q_2 q_3 + q_1 q_4 & q_3^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} \end{pmatrix}^T = 2 \begin{pmatrix} q_1^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} & q_1 q_2 + q_3 q_4 & q_1 q_3 - q_2 q_4 \\ q_1 q_2 - q_3 q_4 & q_2^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} & q_2 q_3 + q_1 q_4 \\ q_1 q_3 + q_2 q_4 & q_2 q_3 - q_1 q_4 & q_3^2 + q_4^2 - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Os elementos deste produto são

$$\begin{aligned}
\frac{\dot{A}A_{1,1}^T}{4} &= 2(q_1\dot{q}_1 + q_4\dot{q}_4)(q_1^2 + q_4^2 - \frac{1}{2}) + (\dot{q}_1q_2 + q_1\dot{q}_2 - \dot{q}_3q_4 - q_3\dot{q}_4)(q_1q_2 - q_3q_4) + (\dot{q}_1q_3 + q_1\dot{q}_3 + \\
&\dot{q}_2q_4 + q_2\dot{q}_4)(q_1q_3 + q_2q_4) \\
\frac{\dot{A}A_{1,2}^T}{4} &= 2(q_1\dot{q}_1 + q_4\dot{q}_4)(q_1q_2 + q_3q_4) + (\dot{q}_1q_2 + q_1\dot{q}_2 - \dot{q}_3q_4 - q_3\dot{q}_4)(q_2^2 + q_4^2 - \frac{1}{2}) + (\dot{q}_1q_3 + q_1\dot{q}_3 + \dot{q}_2q_4 + \\
&q_2\dot{q}_4)(q_2q_3 - q_1q_4) \\
\frac{\dot{A}A_{1,3}^T}{4} &= 2(q_1\dot{q}_1 + q_4\dot{q}_4)(q_1q_3 - q_2q_4) + (\dot{q}_1q_2 + q_1\dot{q}_2 - \dot{q}_3q_4 - q_3\dot{q}_4)(q_2q_3 + q_1q_4) + (\dot{q}_1q_3 + q_1\dot{q}_3 + \dot{q}_2q_4 + \\
&q_2\dot{q}_4)(q_3^2 + q_4^2 - \frac{1}{2}) \\
\frac{\dot{A}A_{2,1}^T}{4} &= (\dot{q}_1q_2 + q_1\dot{q}_2 + \dot{q}_3q_4 + q_3\dot{q}_4)(q_1^2 + q_4^2 - \frac{1}{2}) + 2(q_2\dot{q}_2 + q_4\dot{q}_4)(q_1q_2 - q_3q_4) + (\dot{q}_2q_3 + q_2\dot{q}_3 - \dot{q}_1q_4 - \\
&q_1\dot{q}_4)(q_1q_3 + q_2q_4) \\
\frac{\dot{A}A_{2,2}^T}{4} &= (\dot{q}_1q_2 + q_1\dot{q}_2 + \dot{q}_3q_4 + q_3\dot{q}_4)(q_1q_2 + q_3q_4) + 2(q_2\dot{q}_2 + q_4\dot{q}_4)(q_2^2 + q_4^2 - \frac{1}{2}) + (\dot{q}_2q_3 + q_2\dot{q}_3 - \dot{q}_1q_4 - \\
&q_1\dot{q}_4)(q_2q_3 - q_1q_4) \\
\frac{\dot{A}A_{2,3}^T}{4} &= (\dot{q}_1q_2 + q_1\dot{q}_2 + \dot{q}_3q_4 + q_3\dot{q}_4)(q_1q_3 - q_2q_4) + 2(q_2\dot{q}_2 + q_4\dot{q}_4)(q_2q_3 + q_1q_4) + (\dot{q}_2q_3 + q_2\dot{q}_3 - \dot{q}_1q_4 - \\
&q_1\dot{q}_4)(q_3^2 + q_4^2 - \frac{1}{2}) \\
\frac{\dot{A}A_{3,1}^T}{4} &= (\dot{q}_1q_3 + q_1\dot{q}_3 - \dot{q}_2q_4 - q_2\dot{q}_4)(q_1^2 + q_4^2 - \frac{1}{2}) + (\dot{q}_2q_3 + q_2\dot{q}_3 + \dot{q}_1q_4 + q_1\dot{q}_4)(q_1q_2 - q_3q_4) + 2(q_3\dot{q}_3 + \\
&q_4\dot{q}_4)(q_1q_3 + q_2q_4) \\
\frac{\dot{A}A_{3,2}^T}{4} &= (\dot{q}_1q_3 + q_1\dot{q}_3 - \dot{q}_2q_4 - q_2\dot{q}_4)(q_1q_2 + q_3q_4) + (\dot{q}_2q_3 + q_2\dot{q}_3 + \dot{q}_1q_4 + q_1\dot{q}_4)(q_2^2 + q_4^2 - \frac{1}{2}) + 2(q_3\dot{q}_3 + \\
&q_4\dot{q}_4)(q_2q_3 - q_1q_4) \\
\frac{\dot{A}A_{3,3}^T}{4} &= (\dot{q}_1q_3 + q_1\dot{q}_3 - \dot{q}_2q_4 - q_2\dot{q}_4)(q_1q_3 - q_2q_4) + (\dot{q}_2q_3 + q_2\dot{q}_3 + \dot{q}_1q_4 + q_1\dot{q}_4)(q_2q_3 + q_1q_4) + 2(q_3\dot{q}_3 + \\
&q_4\dot{q}_4)(q_3^2 + q_4^2 - \frac{1}{2})
\end{aligned}$$

Rearrmando os termos de cada elemento e usando que $(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2) = 1$ e $(q_1\dot{q}_1 + q_2\dot{q}_2 + q_3\dot{q}_3 + q_4\dot{q}_4) = 0$, chega-se a

$$\begin{aligned}
\frac{\dot{A}A_{1,1}^T}{4} &= q_1(q_1 \underbrace{(-1 + 2q_1^2 + 2q_4^2 + q_2^2 + q_3^2)}_{q_1^2 + q_4^2} - q_2q_3q_4 + q_2q_3q_4) + \dot{q}_2(q_2(q_1^2 + q_4^2) - q_1q_3q_4 + q_1q_3q_4) + \\
&\dot{q}_3(q_3(q_4^2 + q_1^2) - q_1q_2q_4 + q_1q_2q_4) + \dot{q}_4(q_4 \underbrace{(-1 + 2q_1^2 + 2q_4^2 + q_3^2 + q_2^2)}_{q_1^2 + q_4^2} - q_1q_2q_3 + q_1q_2q_3) \\
&= (q_1^2 + q_4^2)(q_1\dot{q}_1 + q_2\dot{q}_2 + q_3\dot{q}_3 + q_4\dot{q}_4) = 0 \\
\frac{\dot{A}A_{1,2}^T}{4} &= \dot{q}_1(q_1(2q_1q_2 + 2q_3q_4 - q_3q_4) + q_2 \underbrace{(q_2^2 + q_4^2 - 1/2 + q_3^2)}_{1/2 - q_1^2}) + \dot{q}_2(q_2(q_1q_2 + q_3q_4) + q_1(q_4^2 - 1/2 - \\
&q_4^2)) + \dot{q}_3(q_3(q_1q_2) + q_4 \underbrace{(1/2 - q_2^2 - q_4^2 - q_1^2)}_{-1/2 + q_3^2}) + \dot{q}_4(q_4(2q_1q_2 + 2q_3q_4 - q_3q_4 - q_1q_2) + q_3(-q_2^2 + 1/2 + q_2^2)) \\
&= (q_1q_2 + q_3q_4)(q_1\dot{q}_1 + q_2\dot{q}_2 + q_3\dot{q}_3 + q_4\dot{q}_4) + \frac{1}{2}(\dot{q}_1q_2 - q_1\dot{q}_2 - \dot{q}_3q_4 + q_3\dot{q}_4) = \frac{-\omega'_a}{4} \\
\frac{\dot{A}A_{1,3}^T}{4} &= \dot{q}_1(q_1(2q_2q_3 - 2q_2q_4 + q_2q_4) + q_3 \underbrace{(q_3^2 + q_4^2 - 1/2 + q_2^2)}_{1/2 - q_1^2}) + \dot{q}_2(q_2(q_1q_3) + q_4 \underbrace{(q_3^2 + q_4^2 - 1/2 + q_1^2)}_{1/2 - q_2^2}) +
\end{aligned}$$

60CAPÍTULO 2. INVENTANDO UM ASTERÓIDE: DEFINIÇÃO DO MODELO

$$\begin{aligned}
 & \dot{q}_3(q_3(-q_2q_4 + q_1q_3) + q_1(q_4^2 - 1/2 - q_4^2)) + \dot{q}_4(q_4(2q_1q_3 - 2q_2q_4 - q_1q_3 + q_2q_4) + q_2(q_3^2 - 1/2 - q_3^2)) \\
 &= (q_1q_3 - q_2q_4)(q_1\dot{q}_1 + q_2\dot{q}_2 + q_3\dot{q}_3 + q_4\dot{q}_4) + \frac{1}{2}(\dot{q}_1q_3 + \dot{q}_2q_4 - q_1\dot{q}_3 - q_2\dot{q}_4) = \frac{\omega'_2}{4} \\
 \frac{\dot{A}_{2,1}^T}{4} &= \dot{q}_1(q_1(q_1q_2 - q_3q_4) + q_2(q_4^2 - 1/2 - q_4^2)) + \dot{q}_2(q_2(2q_1q_2 - 2q_3q_4 + q_3q_4) + q_1 \underbrace{(q_1^2 + q_4^2 - 1/2 + q_3^2)}_{1/2 - q_2^2}) + \\
 & \dot{q}_3(q_3(q_1q_2) + q_4 \underbrace{(q_1^2 + q_4^2 - 1/2 + q_2^2)}_{1/2 - q_3^2}) + \dot{q}_4(q_4(q_3q_4 + 2q_1q_2 - 2q_3q_4 - q_1q_2) + q_3 \underbrace{(q_1^2 - 1/2 - q_1^2)}_{1/2 - q_2^2}) \\
 &= (q_1q_2 - q_3q_4)(q_1\dot{q}_1 + q_2\dot{q}_2 + q_3\dot{q}_3 + q_4\dot{q}_4) + \frac{1}{2}(-\dot{q}_1q_2 + q_1\dot{q}_2 + q_1\dot{q}_2 + \dot{q}_3q_4 - q_3\dot{q}_4) = \frac{\omega'_3}{4} \\
 \frac{\dot{A}_{2,2}^T}{4} &= \dot{q}_1(q_1(q_2^2 + q_4^2) + q_2q_3q_4 - q_2q_3q_4) + \dot{q}_2(q_2 \underbrace{(q_1^2 + 2q_2^2 + 2q_4^2 - 1 + q_3^2)}_{q_2^2 + q_4^2}) + q_1q_3q_4 - q_1q_3q_4 + \\
 & \dot{q}_3(q_3(q_4^2 + q_2^2) + q_1q_2q_4 - q_1q_2q_4) + \dot{q}_4(q_4 \underbrace{(q_3^2 + 2q_2^2 + 2q_4^2 - 1 + q_1^2)}_{q_2^2 + q_4^2}) + q_1q_2q_3 - q_1q_2q_3 \\
 & (q_2^2 + q_4^2)(q_1\dot{q}_1 + q_2\dot{q}_2 + q_3\dot{q}_3 + q_4\dot{q}_4) = 0 \\
 \frac{\dot{A}_{2,3}^T}{4} &= \dot{q}_1(q_1(q_2q_3) + q_4 \underbrace{(-q_3^2 - q_4^2 + 1/2 - q_2^2)}_{-1/2 + q_1^2}) + \dot{q}_2(q_2(-q_1q_4 + 2q_2q_3 + 2q_1q_4) + q_3 \underbrace{(q_3^2 + q_4^2 - 1/2 + q_1^2)}_{1/2 - q_2^2}) + \\
 & \dot{q}_3(q_3(q_1q_4 + q_2q_3) + q_2 \underbrace{(q_4^2 - 1/2 - q_4^2)}_{1/2 - q_2^2}) + \dot{q}_4(q_4(-q_2q_3 + 2q_2q_3 + 2q_1q_4 - q_1q_4) + q_1 \underbrace{(q_3^2 - q_3^2 + 1/2)}_{1/2 - q_2^2}) \\
 &= (q_1q_4 + q_2q_3)(q_1\dot{q}_1 + q_2\dot{q}_2 + q_3\dot{q}_3 + q_4\dot{q}_4) + \frac{1}{2}(-\dot{q}_1q_4 + \dot{q}_2q_3 - q_2\dot{q}_3 + q_1\dot{q}_4) = \frac{-\omega'_4}{4} \\
 \frac{\dot{A}_{3,1}^T}{4} &= \dot{q}_1(q_1(q_1q_3 + q_2q_4) + q_3 \underbrace{(q_4^2 - 1/2 - q_4^2)}_{-1/2 + q_2^2}) + \dot{q}_2(q_2(q_1q_3) + q_4 \underbrace{(-q_1^2 - q_4^2 + 1/2 - q_3^2)}_{-1/2 + q_2^2}) + \dot{q}_3(q_3(-q_2q_4 + \\
 & 2q_1q_3 + 2q_2q_4) + q_1 \underbrace{(q_1^2 + q_4^2 - 1/2 + q_2^2)}_{1/2 - q_3^2}) + \dot{q}_4(q_4(-q_2q_4 - q_1q_3 + 2q_1q_3 + 2q_2q_4) + q_2 \underbrace{(-q_1^2 + 1/2 + q_1^2)}_{1/2 - q_3^2}) \\
 &= (q_1q_3 + q_2q_4)(q_1\dot{q}_1 + q_2\dot{q}_2 + q_3\dot{q}_3 + q_4\dot{q}_4) + \frac{1}{2}(-\dot{q}_1q_3 - \dot{q}_2q_4 + q_1\dot{q}_3 + q_2\dot{q}_4) = \frac{-\omega'_5}{4} \\
 \frac{\dot{A}_{3,2}^T}{4} &= \dot{q}_1(q_1(q_2q_3) + q_4 \underbrace{(q_3^2 + q_2^2 + q_4^2 - 1/2)}_{1/2 - q_1^2}) + \dot{q}_2(q_2(-q_1q_4 + q_2q_3) + q_3 \underbrace{(-q_4^2 + q_4^2 - 1/2)}_{1/2 - q_1^2}) + \\
 & \dot{q}_3(q_3(q_1q_4 + 2q_2q_3 - 2q_1q_4) + q_2 \underbrace{(q_1^2 + q_2^2 + q_4^2 - 1/2)}_{1/2 - q_1^2}) + \dot{q}_4(q_4(-q_2q_3 + q_1q_4 + 2q_2q_3 - 2q_1q_4) + q_1 \underbrace{(-q_2^2 + \\
 & q_2^2 - 1/2)}_{1/2 - q_1^2})) \\
 &= (q_2q_3 - q_1q_4)(q_1\dot{q}_1 + q_2\dot{q}_2 + q_3\dot{q}_3 + q_4\dot{q}_4) + \frac{1}{2}(\dot{q}_1q_4 - \dot{q}_2q_3 + q_2\dot{q}_3 - q_1\dot{q}_4) = \frac{\omega'_6}{4} \\
 \frac{\dot{A}_{3,3}^T}{4} &= \dot{q}_1(q_1(q_3^2 + q_4^2) - q_2q_3q_4 + q_2q_3q_4) + \dot{q}_2(q_2 \underbrace{(q_4^2 + q_3^2)}_{q_3^2 + q_4^2}) - q_1q_3q_4 + q_1q_3q_4 + \dot{q}_3(q_3 \underbrace{(q_1^2 + q_2^2 + 2q_3^2 + 2q_4^2 - 1)}_{q_3^2 + q_4^2}) - q_1q_2q_4 + \\
 & q_1q_2q_4 + \dot{q}_4(q_4 \underbrace{(q_2^2 + q_1^2 + 2q_3^2 + 2q_4^2 - 1)}_{q_3^2 + q_4^2}) - q_1q_2q_3 + q_1q_2q_3 \\
 &= (q_3^2 + q_4^2)(q_1\dot{q}_1 + q_2\dot{q}_2 + q_3\dot{q}_3 + q_4\dot{q}_4) = 0
 \end{aligned}$$

De onde obtém-se a velocidade angular $\vec{\omega}'$ em função dos quatérnions:

$$\vec{\omega}' = 2 \begin{pmatrix} \dot{q}_1 q_4 - q_1 \dot{q}_4 + q_2 \dot{q}_3 - \dot{q}_2 q_3 \\ \dot{q}_1 q_3 - q_1 \dot{q}_3 + \dot{q}_2 q_4 - q_2 \dot{q}_4 \\ q_1 \dot{q}_2 - \dot{q}_1 q_2 + \dot{q}_3 q_4 - q_3 \dot{q}_4 \end{pmatrix}$$

Definindo o quatérnion $\tilde{\omega}' := (0, \vec{\omega}')$, ele pode ser expresso como função de q e \dot{q} separadamente, ao definir a matriz 4x4 W :

$$\begin{pmatrix} \vec{\omega}' \\ 0 \end{pmatrix} =: 2W \begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \dot{q}_3 \\ \dot{q}_4 \end{pmatrix} = 2W\dot{q} = 2 \begin{pmatrix} W_{1,1}\dot{q}_1 + W_{1,2}\dot{q}_2 + W_{1,3}\dot{q}_3 + W_{1,4}\dot{q}_4 \\ W_{2,1}\dot{q}_1 + W_{2,2}\dot{q}_2 + W_{2,3}\dot{q}_3 + W_{2,4}\dot{q}_4 \\ W_{3,1}\dot{q}_1 + W_{3,2}\dot{q}_2 + W_{3,3}\dot{q}_3 + W_{3,4}\dot{q}_4 \\ W_{4,1}\dot{q}_1 + W_{4,2}\dot{q}_2 + W_{4,3}\dot{q}_3 + W_{4,4}\dot{q}_4 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow W = \begin{pmatrix} q_4 & -q_3 & q_2 & -q_1 \\ q_3 & q_4 & -q_1 & -q_2 \\ -q_2 & q_1 & q_4 & -q_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Esta é uma das escolhas possíveis para W , e é a que será usada neste trabalho. Mas é também comum que W seja definido como

$$\begin{pmatrix} q_4 & -q_3 & q_2 & -q_1 \\ q_3 & q_4 & -q_1 & -q_2 \\ -q_2 & q_1 & q_4 & -q_3 \\ q_1 & q_2 & q_3 & q_4 \end{pmatrix}$$

Com este resultado é possível expressar a energia cinética de rotação em função dos quatérnions e suas derivadas temporais:

$$T_{R_i} = \frac{1}{2} \vec{\omega}'^T I_i \vec{\omega}' = 2\dot{q}^T W^T \begin{pmatrix} I_i & \vec{0} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} W\dot{q}$$

Assim, o lagrangeano do sistema será representado por:

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, q, \dot{q}) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} M_i \dot{\vec{r}}^T \dot{\vec{r}} + 2\dot{q}^T W^T \begin{pmatrix} I_i & \vec{0} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} W \dot{q} \right) - \\ - \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left(V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \sqrt{\frac{\pi^3}{C^3 \det|\Lambda_i + \Lambda_j|}} e^{-C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} - G \frac{M_i M_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right)$$

Para obter as equações de movimento a partir deste lagrangeano, é necessário que ele seja função apenas das $6N$ variáveis independentes escolhidas para o sistema. Por depender de \vec{r} , $\dot{\vec{r}}$, q e \dot{q} , este lagrangeano é função de $8N$ variáveis, com $2N$ vínculos. É necessário então utilizar estes $2N$ vínculos para eliminar $2N$ variáveis. O que pode ser feito eliminando q_4 e \dot{q}_4 , a partir da normalização dos quatérnions:

$$(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2) = 1 \Rightarrow q_4 = \sqrt{1 - q_1^2 - q_2^2 - q_3^2}$$

$$q_1 \dot{q}_1 + q_2 \dot{q}_2 + q_3 \dot{q}_3 + q_4 \dot{q}_4 = \vec{q} \cdot \dot{\vec{q}} + q_4 \dot{q}_4 = 0 \Rightarrow \dot{q}_4 = -\frac{\vec{q} \cdot \dot{\vec{q}}}{q_4}$$

\dot{q}_4 (presente apenas em T_R) pode ser facilmente isolado e eliminado. Para isso, a energia cinética de rotação

$$T_{R_i} = 2\dot{q}^T W^T \begin{pmatrix} I_i & \vec{0} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} W \dot{q}$$

pode ser expressa de forma mais conveniente ao definir a matriz 3×3 \hat{W}

$$W = \begin{pmatrix} q_4 & -q_3 & q_2 & -q_1 \\ q_3 & q_4 & -q_1 & -q_2 \\ -q_2 & q_1 & q_4 & -q_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \hat{W} & -\vec{q} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{W} = \begin{pmatrix} q_4 & -q_3 & q_2 \\ q_3 & q_4 & -q_1 \\ -q_2 & q_1 & q_4 \end{pmatrix}$$

Assim, T_{R_i} se torna

$$\begin{aligned}
T_{R_i} &= 2\dot{q}^T \begin{pmatrix} \hat{W}^T & \vec{0} \\ -\vec{q}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_i & \vec{0} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{W} & -\vec{q} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} \dot{q} \\
&= 2\dot{q}^T \begin{pmatrix} \hat{W}^T & \vec{0} \\ -\vec{q}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_i \hat{W} & -I_i \vec{q} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} \dot{q} \\
&= 2\dot{q}^T \begin{pmatrix} \hat{W}^T I_i \hat{W} & -\hat{W}^T I_i \vec{q} \\ \vec{q}^T I_i \hat{W} & \vec{q}^T I_i \vec{q} \end{pmatrix} \dot{q} = 2 \begin{pmatrix} \dot{q}^T & \dot{q}_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{W}^T I_i \hat{W} & -\hat{W}^T I_i \vec{q} \\ \vec{q}^T I_i \hat{W} & \vec{q}^T I_i \vec{q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{q} \\ \dot{q}_4 \end{pmatrix} \\
&= 2 \begin{pmatrix} \dot{q}^T & \dot{q}_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{W}^T I_i \hat{W} \dot{q} - \hat{W}^T I_i \vec{q} \dot{q}_4 \\ \vec{q}^T I_i \hat{W} \dot{q} + \vec{q}^T I_i \vec{q} \dot{q}_4 \end{pmatrix} \\
&= 2\dot{q}^T \hat{W}^T I_i \hat{W} \dot{q} - 2\dot{q}_4 \dot{q}^T \hat{W}^T I_i \vec{q} - 2\dot{q}_4 \vec{q}^T I_i \hat{W} \dot{q} + 2\dot{q}_4^2 \vec{q}^T I_i \vec{q}
\end{aligned}$$

De onde \dot{q}_4 pode ser eliminado, usando que $\dot{q}_4 = -\frac{\vec{q} \cdot \dot{\vec{q}}}{q_4}$:

$$\begin{aligned}
T_{R_i} &= 2\dot{q}^T \hat{W}^T I_i \hat{W} \dot{q} + 2\dot{q}^T \hat{W}^T I_i \vec{q} \left(\frac{\vec{q}^T \dot{\vec{q}}}{q_4} \right) + 2\frac{\dot{q}^T \vec{q}}{q_4} \vec{q}^T I_i \hat{W} \dot{q} + 2\vec{q}^T I_i \vec{q} \left(\frac{\dot{q}^T \vec{q}}{q_4} \right) \left(\frac{\vec{q}^T \dot{\vec{q}}}{q_4} \right) \\
&= 2\dot{q}^T \left[\hat{W}^T I_i \hat{W} + \frac{1}{q_4} \hat{W}^T I_i \vec{q} \vec{q}^T + \frac{1}{q_4} \vec{q} \vec{q}^T I_i \hat{W} + \left(\frac{1}{q_4^2} \vec{q}^T I_i \vec{q} \right) \vec{q} \vec{q}^T \right] \dot{q}
\end{aligned}$$

O que permite dar uma forma mais conveniente ao lagrangeano, definindo a matriz simétrica 3x3 \hat{T} , que é função apenas de q :

$$\begin{aligned}
\hat{T} &:= 4 \left[\hat{W}^T I_i \hat{W} + \frac{1}{q_4} \hat{W}^T I_i \vec{q} \vec{q}^T + \frac{1}{q_4} \vec{q} \vec{q}^T I_i \hat{W} + \left(\frac{1}{q_4^2} \vec{q}^T I_i \vec{q} \right) \vec{q} \vec{q}^T \right] \\
&\Rightarrow T_{R_i} = \frac{1}{2} \dot{q}^T \hat{T} \dot{q}
\end{aligned}$$

2.4 Desenvolvimento das equações de movimento

A eliminação da dependência de q_4 será feita implicitamente, nas derivadas do lagrangeano. Para uma função $F(q_1, q_2, q_3, q_4)$, o vínculo existente entre as suas

variáveis permite que uma delas (no caso, a escolhida foi q_4) seja eliminada de suas derivadas parciais:

$$\frac{dF}{dq_i} = \frac{\partial F}{\partial q_i} + \frac{\partial F}{\partial q_4} \frac{\partial q_4}{\partial q_i}$$

Para $i = 1, 2, 3$, sendo então as variáveis q_1, q_2, q_3 independentes. O mesmo se aplica para funções que dependam também de outras variáveis que sejam independentes de q_1, q_2, q_3, q_4 . A derivada $\frac{\partial q_4}{\partial q_i}$ pode ser obtida do vínculo

$$q_4 = \sqrt{1 - q_1^2 - q_2^2 - q_3^2}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial q_4}{\partial q_i} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{1 - q_1^2 - q_2^2 - q_3^2}} (-2q_i) = -\frac{q_i}{q_4}$$

Assim

$$\frac{dF}{dq_i} = \frac{\partial F}{\partial q_i} - \frac{\partial F}{\partial q_4} \frac{q_i}{q_4}$$

Desta forma, as equações de movimento podem então ser obtidas ao aplicar a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \xi} = 0$$

ao lagrangeano

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, q, \dot{q}) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} \dot{\vec{r}}^T M_i \dot{\vec{r}} + \frac{1}{2} \dot{q}^T \hat{T} \dot{q} \right) -$$

$$- \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left(V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \sqrt{\frac{\pi^3}{C^3 \det|\Lambda_i + \Lambda_j|}} e^{-C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} - G \frac{M_i M_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right)$$

Para evitar de trabalhar com equações de segunda ordem, cada uma destas equações será transformada em um sistema de equações diferenciais de primeira

ordem acopladas. O que será feito ao trabalhar com os momentos conjugados às variáveis, definidos por

$$\begin{aligned} p_\xi &:= \frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}} \\ \Rightarrow \vec{p}_r &:= M\dot{\vec{r}} \\ \Rightarrow \vec{p} &:= \hat{T}\dot{\vec{q}} \end{aligned}$$

De forma a ter

$$\begin{aligned} p_\xi &:= \frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}} \\ \frac{dp_\xi}{dt} &= \frac{\partial L}{\partial \xi} \end{aligned}$$

Para não sobrecarregar a notação, será usado \vec{p} no lugar de \vec{p}_q , como deveria ser feito ao seguir a notação acima.

Desta forma, as equações de movimento para as variáveis \vec{r}_i e \vec{q}_i formam o sistema

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \frac{1}{M}\vec{p}_{r_i} \quad (2.7)$$

$$\frac{d\vec{p}_{r_i}}{dt} = \vec{\nabla}_{r_i} L = -\vec{\nabla}_{r_i} V_G - \vec{\nabla}_{r_i} V_C \quad (2.8)$$

$$\frac{d\vec{q}_i}{dt} = \hat{T}^{-1}\vec{p}_i \quad (2.9)$$

$$\frac{d\vec{p}_i}{dt} = \vec{\nabla}_{q_i} L = \left(\vec{\nabla}_{q_i} T_R - \frac{\partial T_R}{\partial q_4} \frac{\vec{q}}{q_4} \right) - \left(\vec{\nabla}_{q_i} V_C - \frac{\partial V_C}{\partial q_4} \frac{\vec{q}}{q_4} \right) \quad (2.10)$$

$$(2.11)$$

Da forma com foi feita a eliminação da quarta variável, escolhendo arbitrariamente a variável q_4 , há a possibilidade de indeterminações nas definições de \dot{q}_4 e \ddot{q}_4 quando $q_4 = 0$, e que pode ocasionar problemas mesmo com $q_4 \neq 0$, se $|q_4| \ll 1$,

devido aos erros numéricos nos cálculos. Nos primeiros testes dos programa este problema se mostrou importante, o que levou a uma alteração no algoritimo utilizado. Para contornar o problema, a variável a ser eliminada passou a ser escolhida (em cada passo) como a de maior módulo, de forma a garantir que a variável eliminada nunca seja nula (como $q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2 = 1$, no máximo 3 variáveis são nulas simultaneamente). O procedimento de eliminação das outras variáveis foi feito de forma inteiramente análoga, aproveitando o procedimento aqui descrito para q_4 . Para a eliminação da variável q_i nas derivadas do lagrangeano, usamos então

$$q_i = \sqrt{1 - \sum_{j=1, j \neq i}^4 q_j^2}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial q_i}{\partial q_j} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{1 - \sum_{j=1, j \neq i}^4 q_j^2}} (-2q_j) = -\frac{q_j}{q_i}$$

Assim

$$\frac{dF}{dq_j} = \frac{\partial F}{\partial q_j} - \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{q_j}{q_i}$$

Para a eliminação de \dot{q}_i na energia cinética de rotação, o procedimento é totalmente análogo ao utilizado anteriormente para q_4 . Partindo de

$$T_{R_i} = 2\dot{q}^T W^T \begin{pmatrix} I_i & \vec{0} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} W \dot{q}$$

Onde

$$W = \begin{pmatrix} q_4 & -q_3 & q_2 & -q_1 \\ q_3 & q_4 & -q_1 & -q_2 \\ -q_2 & q_1 & q_4 & -q_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \hat{W} & -\vec{q} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{W} = \begin{pmatrix} q_4 & -q_3 & q_2 \\ q_3 & q_4 & -q_1 \\ -q_2 & q_1 & q_4 \end{pmatrix}$$

Ao fazer uma permutação cíclica de q_4 e da última coluna de W esta equação não se altera:

$$\begin{aligned}
T_{R_i} &= 2 \begin{pmatrix} \dot{q}_1 & \dot{q}_2 & \dot{q}_3 & \dot{q}_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_4 & -q_3 & q_2 & -q_1 \\ q_3 & q_4 & -q_1 & -q_2 \\ -q_2 & q_1 & q_4 & -q_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} I_i & \vec{0} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_4 & -q_3 & q_2 & -q_1 \\ q_3 & q_4 & -q_1 & -q_2 \\ -q_2 & q_1 & q_4 & -q_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \dot{q}_3 \\ \dot{q}_4 \end{pmatrix} \\
&= 2 \begin{pmatrix} \dot{q}_4 & \dot{q}_1 & \dot{q}_2 & \dot{q}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -q_1 & q_4 & -q_3 & q_2 \\ -q_2 & q_3 & q_4 & -q_1 \\ -q_3 & -q_2 & q_1 & q_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} I_i & \vec{0} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -q_1 & q_4 & -q_3 & q_2 \\ -q_2 & q_3 & q_4 & -q_1 \\ -q_3 & -q_2 & q_1 & q_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{q}_4 \\ \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \dot{q}_3 \end{pmatrix} = \\
&= 2 \dot{q}_3'^T V_3^T \begin{pmatrix} I_i & \vec{0} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} V_3 \dot{q}_3'
\end{aligned}$$

Onde foram definidos

$$\begin{aligned}
q_3' &:= \begin{pmatrix} q_4 \\ q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \vec{q}_3' \\ q_3 \end{pmatrix} \\
q_{34}' &:= q_3 \\
\hat{V}_3 &:= \begin{pmatrix} -q_1 & q_4 & -q_3 \\ -q_2 & q_3 & q_4 \\ -q_3 & -q_2 & q_1 \end{pmatrix} \\
\vec{\chi}_3 &:= \begin{pmatrix} -q_2 \\ q_1 \\ -q_4 \end{pmatrix} \\
V_3 &:= \begin{pmatrix} -q_1 & q_4 & -q_3 & q_2 \\ -q_2 & q_3 & q_4 & -q_1 \\ -q_3 & -q_2 & q_1 & q_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{V}_3 & -\vec{\chi}_3 \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Ao continuar este desenvolvimento da mesma maneira que realizado anteriormente para eliminar q_4 , pode-se eliminar q_3 . Para eliminar uma i -ésima componente qualquer o procedimento será o mesmo, bastando para isso utilizar V_i , q'_i e $\vec{\chi}_i$ como definidos abaixo:

Realizando mais uma permutação cíclica obtém-se de forma totalmente análoga:

$$q'_2 := \begin{pmatrix} q_3 \\ q_4 \\ q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \vec{q}'_2 \\ q_2 \end{pmatrix}$$

$$q'_{2_4} := q_2$$

$$\hat{V}_2 := \begin{pmatrix} q_2 & -q_1 & q_4 \\ -q_1 & -q_2 & q_3 \\ q_4 & -q_3 & -q_2 \end{pmatrix}$$

$$\vec{\chi}_2 := \begin{pmatrix} q_3 \\ -q_4 \\ -q_1 \end{pmatrix}$$

$$V_2 := \begin{pmatrix} q_2 & -q_1 & q_4 & -q_3 \\ -q_1 & -q_2 & q_3 & q_4 \\ q_4 & -q_3 & -q_2 & q_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{V}_2 & -\vec{\chi}_2 \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix}$$

O que permite eliminar q_2 . Com mais uma permutação cíclica, para eliminar q_1 :

$$q'_1 := \begin{pmatrix} q_2 \\ q_3 \\ q_4 \\ q_1 \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \vec{q}'_1 \\ q_2 \end{pmatrix}$$

$$q'_{1_4} := q_1$$

$$\hat{V}_1 := \begin{pmatrix} -q_3 & q_2 & -q_1 \\ q_4 & -q_1 & -q_2 \\ q_1 & q_4 & -q_3 \end{pmatrix}$$

$$\vec{\chi}_1 := \begin{pmatrix} -q_4 \\ -q_3 \\ q_2 \end{pmatrix}$$

$$V_1 := \begin{pmatrix} -q_3 & q_2 & -q_1 & q_4 \\ q_4 & -q_1 & -q_2 & q_3 \\ q_1 & q_4 & -q_3 & -q_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{V}_1 & -\vec{\chi}_1 \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix}$$

O que permite eliminar \dot{q}_1 . Para unificar a notação com o já desenvolvido para eliminar \dot{q}_4 basta fazer mais uma permutação cíclica, e notar que:

$$q'_4 := q$$

$$\vec{q}'_4 := \vec{q}$$

$$q'_{44} := q_4$$

$$\hat{V}_4 := \hat{W}$$

$$\vec{\chi}_4 := -\vec{q}$$

$$V_4 := W$$

O procedimento geral para a eliminação da j -ésima componente é então:

$$T_{R_i} = 2\dot{q}_j^T \begin{pmatrix} \hat{V}_j^T & \vec{0} \\ -\vec{\chi}_j^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_i & \vec{0} \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{V}_j & -\vec{\chi}_j \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} \dot{q}_j$$

$$= 2\dot{q}_j^T \begin{pmatrix} \hat{V}_j^T & \vec{0} \\ -\vec{\chi}_j^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_i \hat{V}_j & -I_i \vec{\chi}_j \\ \vec{0}^T & 0 \end{pmatrix} \dot{q}_j$$

$$= 2\dot{q}_j^T \begin{pmatrix} \hat{V}_j^T I_i \hat{V}_j & -\hat{V}_j^T I_i \vec{\chi}_j \\ \vec{\chi}_j^T I_i \hat{V}_j & \vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j \end{pmatrix} \dot{\chi}_j = 2 \begin{pmatrix} \dot{q}_j^T & \dot{q}_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{V}_j^T I_i \hat{V}_j & -\hat{V}_j^T I_i \vec{\chi}_j \\ \vec{\chi}_j^T I_i \hat{V}_j & \vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{q}_j \\ \dot{q}_j \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
&= 2 \begin{pmatrix} \dot{q}_j^T & \dot{q}_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{V}_j^T I_i \hat{V}_j \dot{q}_j - \hat{V}_j^T I_i \vec{\chi}_j \dot{q}_j \\ \vec{\chi}_j^T I_i \hat{V}_j \dot{q}_j + \vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j \dot{q}_j \end{pmatrix} \\
&= 2 \dot{q}_j^T \hat{V}_j^T I_i \hat{V}_j \dot{q}_j - 2 \dot{q}_j \dot{q}_j^T \hat{V}_j^T I_i \vec{\chi}_j - 2 \dot{q}_j \vec{\chi}_j^T I_i \hat{V}_j \dot{q}_j + 2 \dot{q}_j^2 \vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j
\end{aligned}$$

De onde \dot{q}_j pode ser eliminado, usando que $\dot{q}_j = -\frac{\vec{q}_j \cdot \dot{\vec{q}}_j}{q_j}$:

$$\begin{aligned}
T_{R_i} &= 2 \dot{q}_j^T \hat{V}_j^T I_i \hat{V}_j \dot{q}_j + 2 \dot{q}_j^T \hat{V}_j^T I_i \vec{\chi}_j \left(\frac{\vec{q}_j^T \dot{\vec{q}}_j}{q_j} \right) + 2 \frac{\dot{\vec{q}}_j^T \vec{q}_j}{q_j} \vec{\chi}_j^T I_i \hat{V}_j \dot{q}_j + 2 \vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j \left(\frac{\dot{\vec{q}}_j^T \dot{\vec{q}}_j}{q_j} \right) \left(\frac{\vec{q}_j^T \dot{\vec{q}}_j}{q_j} \right) \\
&= 2 \dot{q}_j^T \left[\hat{V}_j^T I_i \hat{V}_j + \frac{1}{q_j} \hat{V}_j^T I_i \vec{\chi}_j \vec{q}_j^T + \frac{1}{q_j} \vec{q}_j \vec{\chi}_j^T I_i \hat{V}_j + \left(\frac{1}{q_j^2} \vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j \right) \vec{q}_j \vec{q}_j^T \right] \dot{\vec{q}}
\end{aligned}$$

Definindo a matriz simétrica 3x3 \hat{T}_j , que é função apenas de q :

$$\begin{aligned}
\hat{T}_j &:= 4 \left[\hat{V}_j^T I_i \hat{V}_j + \frac{1}{q_j} \hat{V}_j^T I_i \vec{\chi}_j \vec{q}_j^T + \frac{1}{q_j} \vec{q}_j \vec{\chi}_j^T I_i \hat{V}_j + \left(\frac{1}{q_j^2} \vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j \right) \vec{q}_j \vec{q}_j^T \right] \\
\Rightarrow T_{R_i} &= \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}_j^T \hat{T}_j \dot{\vec{q}}_j
\end{aligned}$$

O que completa o procedimento de eliminação da j -ésima componente.

Resta apenas calcular as derivadas presentes nas equações para os momentos.

2.4.1 Desenvolvimento das derivadas do lagrangeano

As derivadas do potencial em relação a \vec{r} são

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}_{r_i} V_G &= \vec{\nabla}_{r_i} \left[\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left(-G \frac{M_i M_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right) \right] \\
&= -GM_i \sum_{j=1, j \neq i}^N M_j \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \\
\vec{\nabla}_{r_i} V_C &= \vec{\nabla}_{r_i} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left(V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \sqrt{\frac{\pi^3}{C^3 \det|\Lambda_i + \Lambda_j|}} e^{-C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right) \\
&= - \sum_{j=1, j \neq i}^N \left[CV_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \sqrt{\frac{\pi^3}{C^3 \det|\Lambda_i + \Lambda_j|}} e^{-C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \vec{\nabla}_{r_i} \left((\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= - \sum_{j=1, j \neq i}^N \left[CV_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \sqrt{\frac{\pi^3}{C^3 \det|\Lambda_i + \Lambda_j|}} e^{-C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} (2Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)) \right] \\
&= -2 \sum_{j=1, j \neq i}^N CV_{C_{i,j}}(Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j))
\end{aligned}$$

(Foi usado que $\vec{\nabla}_{\vec{r}_i} \left((\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right) = Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) + (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j} = 2Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$)

As derivadas do potencial em relação a q são

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}_{q_i} V_C &= \vec{\nabla}_{q_i} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left(V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \sqrt{\frac{\pi^3}{C^3 \det|\Lambda_i + \Lambda_j|}} e^{-C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right) \\
&= \sum_{j=1, j \neq i}^N V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \sqrt{\frac{\pi^3}{C^3}} \vec{\nabla}_{q_i} \left[\frac{e^{-C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}}{\sqrt{\det|\Lambda_i + \Lambda_j|}} \right] \\
&= \sum_{j=1, j \neq i}^N V_0 \rho_{i_0} \rho_{j_0} \sqrt{\frac{\pi^3}{C^3}} e^{-C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \\
&\quad \left[\vec{\nabla}_{q_i} \left(\frac{1}{\sqrt{\det|\Lambda_i + \Lambda_j|}} \right) - \frac{C}{\sqrt{\det|\Lambda_i + \Lambda_j|}} \vec{\nabla}_{q_i} \left((\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right) \right] \\
&= \sum_{j=1, j \neq i}^N V_{C_{i,j}} \left[\sqrt{\det|\Lambda_i + \Lambda_j|} \vec{\nabla}_{q_i} \left(\frac{1}{\sqrt{\det|\Lambda_i + \Lambda_j|}} \right) - C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T \vec{\nabla}_{q_i} Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right] \\
&= \sum_{j=1, j \neq i}^N V_{C_{i,j}} \left[-\frac{1}{2} \vec{\nabla}_{q_i} (\det|\Lambda_i + \Lambda_j|) - C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T \vec{\nabla}_{q_i} Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right]
\end{aligned}$$

Foi usado que para uma matriz inversível $M(a)$ qualquer

$$\begin{aligned}
MM^{-1} = \hat{1} &\Rightarrow \frac{\partial M}{\partial a} M^{-1} + M \frac{\partial M^{-1}}{\partial a} = \hat{0} \\
&\Rightarrow \frac{\partial M^{-1}}{\partial a} = -M^{-1} \frac{\partial M}{\partial a} M^{-1}
\end{aligned}$$

É necessário calcular a derivada do determinante de uma matriz. Para uma matriz qualquer $M(a)$

$$\begin{aligned}
\frac{d(\det|M(a)|)}{da} &= \lim_{\delta a \rightarrow 0} \frac{\det|M(a + \delta a)| - \det|M(a)|}{\delta a} \\
&= \lim_{\delta a \rightarrow 0} \frac{\det\left|M(a) + \frac{dM(a)}{da}\delta a\right| - \det|M(a)|}{\delta a} \\
&= \lim_{\delta a \rightarrow 0} \frac{\det\left|M(a)\left(\hat{1} + M(a)^{-1}\frac{dM(a)}{da}\delta a\right)\right| - \det|M(a)|}{\delta a} \\
&= \lim_{\delta a \rightarrow 0} \frac{\det|M(a)|\det\left|\hat{1} + M(a)^{-1}\frac{dM(a)}{da}\delta a\right| - \det|M(a)|}{\delta a}
\end{aligned}$$

Usando que $\det|\hat{1} + \epsilon M| = 1 + \epsilon \text{Tr}|M| + O(\epsilon^2)$

$$\begin{aligned}
\frac{d(\det|M(a)|)}{da} &= \lim_{\delta a \rightarrow 0} \frac{\det|M(a)|\left(1 + \delta \text{Tr}\left|M(a)^{-1}\frac{dM(a)}{da}\right|\right) - \det|M(a)|}{\delta a} \\
&= \det|M(a)|\text{Tr}\left|M(a)^{-1}\frac{dM(a)}{da}\right|
\end{aligned}$$

Assim

$$\vec{\nabla}_{q_i} V_C = \sum_{j=1, j \neq i}^N V_{C_{i,j}} \left[-\frac{1}{2} \text{Tr} \left(\frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \vec{\nabla}_{q_i} \Lambda_i \right) - C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T \vec{\nabla}_{q_i} Q_{i,j}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right]$$

De forma semelhante, a derivada do potencial de contato em relação a q_{i4} será

$$\frac{\partial V_C}{\partial q_{i4}} = \sum_{j=1, j \neq i}^N V_{C_{i,j}} \left[-\frac{1}{2} \text{Tr} \left(\frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \frac{\partial \Lambda_i}{\partial q_{i4}} \right) - C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T \frac{\partial Q_{i,j}}{\partial q_{i4}}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right]$$

Onde é usada a notação

$$\vec{\nabla}_{q_i} Q_{i,j} = \begin{pmatrix} \frac{\partial Q_{i,j}}{\partial q_{i1}} \\ \frac{\partial Q_{i,j}}{\partial q_{i2}} \\ \frac{\partial Q_{i,j}}{\partial q_{i3}} \end{pmatrix}$$

Pela definição de $Q_{i,j}$

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}_{q_i} Q_{i,j} &= \vec{\nabla}_{q_i} \left(\Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j \right) \\
&= \vec{\nabla}_{q_i} (\Lambda_i) \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j - \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \vec{\nabla}_{q_i} (\Lambda_i) \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j \\
&= \left(\hat{1} - \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \right) \vec{\nabla}_{q_i} \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j = \left((\Lambda_i + \Lambda_j) \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} - \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \right) \vec{\nabla}_{q_i} \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j \\
&= \Lambda_j \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \vec{\nabla}_{q_i} \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j
\end{aligned}$$

De forma totalmente análoga

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Q_{i,j}}{\partial q_{4i}} &= \frac{\partial}{\partial q_{4i}} \left(\Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j \right) \\
&= \frac{\partial \Lambda_i}{\partial q_{4i}} \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j - \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \frac{\partial \Lambda_i}{\partial q_{4i}} \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j \\
&= \left(\hat{1} - \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \right) \frac{\partial \Lambda_i}{\partial q_{4i}} \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j = \left((\Lambda_i + \Lambda_j) \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} - \Lambda_i \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \right) \frac{\partial \Lambda_i}{\partial q_{4i}} \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j \\
&= \Lambda_j \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \frac{\partial \Lambda_i}{\partial q_{4i}} \frac{1}{\Lambda_i + \Lambda_j} \Lambda_j
\end{aligned}$$

E pela definição de Λ_i ,

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}_{q_i} \Lambda_i &= \vec{\nabla}_{q_i} (A^T E A) = \left(\vec{\nabla}_{q_i} (A^T) E A + A^T E \vec{\nabla}_{q_i} (A) \right) \\
\frac{\partial \Lambda_i}{\partial q_{i4}} &= \left(\frac{\partial A^T}{\partial q_{i4}} E A + A^T E \frac{\partial A}{\partial q_{i4}} \right)
\end{aligned}$$

As derivadas de A são

$$\frac{\partial A}{\partial q_{i1}} = 2 \begin{pmatrix} 2q_1 & q_2 & q_3 \\ q_2 & 0 & -q_4 \\ q_3 & q_4 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial A}{\partial q_{i_2}} = 2 \begin{pmatrix} 0 & q_1 & q_4 \\ q_1 & 2q_2 & q_3 \\ -q_4 & q_3 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial A}{\partial q_{i_3}} = 2 \begin{pmatrix} 0 & -q_4 & q_1 \\ q_4 & 0 & q_2 \\ q_1 & q_2 & 2q_3 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial A}{\partial q_{i_4}} = 2 \begin{pmatrix} 2q_4 & -q_3 & q_2 \\ q_3 & 2q_4 & -q_1 \\ -q_2 & q_1 & 2q_4 \end{pmatrix}$$

Resta apenas calcular as derivadas de T_R em relação a q

$$\vec{\nabla}_{q_i} T_R = \vec{\nabla}_{q_i} \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^T \hat{T} \dot{\vec{q}} \right) = \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^T \vec{\nabla}_{q_i} \hat{T} \dot{\vec{q}}$$

$$\frac{\partial T_R}{\partial q_{i_4}} = \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^T \frac{\partial \hat{T}}{\partial q_{i_4}} \dot{\vec{q}}$$

As derivadas de \hat{T} são

$$\vec{\nabla}_{q_i} \hat{T} = \vec{\nabla}_{q_i} \left(4 \left[\hat{W}^T I_i \hat{W} + \frac{1}{q_4} \hat{W}^T I_i \vec{q} \vec{q}^T + \frac{1}{q_4} \vec{q} \vec{q}^T I_i \hat{W} + \left(\frac{1}{q_4^2} \vec{q}^T I_i \vec{q} \right) \vec{q} \vec{q}^T \right] \right)$$

$$\frac{\vec{\nabla}_{q_i} T_R}{4} = \vec{\nabla}_{q_i} (\hat{W})^T I_i \hat{W} + \hat{W}^T I_i \vec{\nabla}_{q_i} (\hat{W}) + \vec{\nabla}_{q_i} \left(\frac{1}{q_4} \right) (\hat{W}^T I_i \vec{q} \vec{q}^T + \vec{q} \vec{q}^T I_i \hat{W}) +$$

$$\frac{1}{q_4} (\vec{\nabla}_{q_i} \hat{W}^T) I_i \vec{q} \vec{q}^T + \hat{W}^T I_i \vec{\nabla}_{q_i} (\vec{q} \vec{q}^T) + \vec{\nabla}_{q_i} (\vec{q} \vec{q}^T) I_i \hat{W} + \vec{q} \vec{q}^T I_i \vec{\nabla}_{q_i} (\hat{W}) + \vec{\nabla}_{q_i} (\vec{q}^T I_i \vec{q}) \left(\frac{1}{q_4} \right)^2 \vec{q} \vec{q}^T +$$

$$(\vec{q}^T I_i \vec{q}) \vec{\nabla}_{q_i} \left(\frac{1}{q_4} \right)^2 \vec{q} \vec{q}^T + (\vec{q}^T I_i \vec{q}) \left(\frac{1}{q_4} \right)^2 \vec{\nabla}_{q_i} (\vec{q} \vec{q}^T)$$

E de forma análoga

$$\frac{1}{4} \frac{\partial T_R}{\partial q_4} = \frac{\partial \hat{W}^T}{\partial q_4} I_i \hat{W} + \hat{W}^T I_i \frac{\partial \hat{W}}{\partial q_4} + \frac{\partial}{\partial q_4} \left(\frac{1}{q_4} \right) \left(\hat{W}^T I_i \vec{q} \vec{q}^T + \vec{q} \vec{q}^T I_i \hat{W} \right) + \frac{1}{q_4} \left(\frac{\partial \hat{W}^T}{\partial q_4} I_i \vec{q} \vec{q}^T + \vec{q} \vec{q}^T I_i \frac{\partial \hat{W}}{\partial q_4} \right) + (\vec{q}^T I_i \vec{q}) \frac{\partial}{\partial q_4} \left(\frac{1}{q_4} \right)^2 \vec{q} \vec{q}^T$$

Da definição de \hat{W}

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial q_{i_1}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial q_{i_2}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial q_{i_3}} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial q_{i_4}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

As derivadas restantes são

$$\vec{\nabla}_{q_i} (\vec{q} \vec{q}^T) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \vec{q}^T + \vec{q} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \vec{q}$$

$$\vec{\nabla}_{q_i} (\vec{q}^T I_i \vec{q}) = 2I_i \vec{q}$$

$$\frac{\partial}{\partial q_4} \left(\frac{1}{q_4} \right) = -\frac{1}{q_4^2}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial q_4} \left(\frac{1}{q_4} \right)^2 &= -2 \frac{1}{q_4^3} \\ \vec{\nabla}_{q_i} \left(\frac{1}{q_4} \right) &= \frac{\vec{q}}{q_4^3} \\ \vec{\nabla}_{q_i} \left(\frac{1}{q_4} \right)^2 &= \frac{2\vec{q}}{q_4^4}\end{aligned}$$

Ao eliminar a componente j -ésima, as únicas derivadas cuja mudança não é trivial (correspondente apenas à substituição direta das variáveis correspondentes) são:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}_{q'_i} T_R &= \vec{\nabla}_{q'_i} \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \dot{q}'^T \hat{T}_j \dot{q}' \right) = \frac{1}{2} \dot{q}'^T \vec{\nabla}_{q'_i} \hat{T}_j \dot{q}' \\ \frac{\partial T_R}{\partial q'_{i4}} &= \frac{1}{2} \dot{q}'^T \frac{\partial \hat{T}_j}{\partial q'_{i4}} \dot{q}'\end{aligned}$$

As derivadas de \hat{T}_j

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}_{q'_{ji}} \hat{T}_j &= \vec{\nabla}_{q'_{ji}} \left(4 \left[\hat{V}_j^T I_i \hat{V}_j + \frac{1}{q_j} \hat{V}_j^T I_i \vec{\chi}_j \vec{q}'^T + \frac{1}{q_j} \vec{q}' \vec{\chi}_j^T I_i \hat{V}_j + \left(\frac{1}{q_j^2} \vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j \right) \vec{q}' \vec{q}'^T \right] \right) \\ \frac{\vec{\nabla}_{q'_{ji}} T_R}{4} &= \vec{\nabla}_{q'_{ji}} (\hat{V}_j) T I_i \hat{V}_j + \hat{V}_j^T I_i \vec{\nabla}_{q'_{ji}} (\hat{V}_j) + \vec{\nabla}_{q'_{ji}} \left(\frac{1}{q_j} \right) \left(\hat{V}_j^T I_i \vec{\chi}_j \vec{q}'^T + \vec{q}' \vec{\chi}_j^T I_i \hat{V}_j \right) + \\ &\frac{1}{q_j} \left(\vec{\nabla}_{q'_{ji}} \hat{V}_j^T I_i \vec{\chi}_j \vec{q}'^T + \hat{V}_j^T I_i \vec{\nabla}_{q'_{ji}} (\vec{\chi}_j \vec{q}'^T) + \vec{\nabla}_{q'_{ji}} (\vec{q}' \vec{\chi}_j^T) I_i \hat{V}_j + \vec{q}' \vec{\chi}_j^T I_i \vec{\nabla}_{q'_{ji}} (\hat{V}_j) \right) + \\ \vec{\nabla}_{q'_{ji}} (\vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j) \left(\frac{1}{q_j} \right)^2 \vec{q}' \vec{q}'^T &+ (\vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j) \vec{\nabla}_{q'_{ji}} \left(\frac{1}{q_j} \right)^2 \vec{q}' \vec{q}'^T + (\vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j) \left(\frac{1}{q_j} \right)^2 \vec{\nabla}_{q'_{ji}} (\vec{q}' \vec{q}'^T)\end{aligned}$$

E de forma análoga

$$\begin{aligned}\frac{1}{4} \frac{\partial T_R}{\partial q_j} &= \frac{\partial \hat{V}_j^T}{\partial q_j} I_i \hat{V}_j + \hat{V}_j^T I_i \frac{\partial \hat{V}_j}{\partial q_j} + \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{1}{q_j} \right) \left(\hat{V}_j^T I_i \vec{\chi}_j \vec{q}'^T + \vec{q}' \vec{\chi}_j^T I_i \hat{V}_j \right) + \frac{1}{q_j} \left(\frac{\partial \hat{V}_j^T}{\partial q_j} I_i \vec{\chi}_j \vec{q}'^T + \vec{q}' \vec{\chi}_j^T I_i \frac{\partial \hat{V}_j}{\partial q_j} \right) + \\ (\vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j) \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{1}{q_j} \right)^2 \vec{q}' \vec{q}'^T &+ (\vec{\chi}_j^T I_i \vec{\chi}_j) \left(\frac{1}{q_j} \right)^2 \vec{\nabla}_{q'_{ji}} (\vec{q}' \vec{q}'^T)\end{aligned}$$

Estão então obtidas todas as equações de movimento. São $12N$ equações diferenciais de primeira ordem, que serão integradas numericamente.

Capítulo 3

Fazendo o Asteróide: Implementação Computacional do Modelo

Após obtidas as equações diferenciais resultantes do modelo, é necessário desenvolver o código para a sua integração numérica no tempo. Este código foi desenvolvido utilizando a linguagem FORTRAN padrão 90. O padrão 90 foi o escolhido basicamente pela implementação do recurso de alocação dinâmica de matrizes, que foi considerada extremamente útil para este código.

No desenvolvimento do código é necessário escolher o nível de linguagem a ser utilizado para a programação. Linguagens de alto nível (linguagens mais próximas do nível do usuário) têm a vantagem de simplificar e agilizar o desenvolvimento; mas como é necessário que elas sejam transcritas para uma linguagem de baixo nível ("linguagem de máquina") para sua execução pelo computador, programas desenvolvidos em alto nível são menos eficientes, já que esta tradução (a compilação) consome tempo e o seu resultado não é, em geral, um código de baixo nível eficiente. De uma forma geral, quanto mais otimizado e quanto mais baixo o nível da linguagem utilizado no desenvolvimento do software, mais eficiente ele vai ser

quando executado, mas mais difícil vai ser o seu desenvolvimento. O código foi desenvolvido em relativamente alto nível, o que compromete a sua rapidez mas aumenta a sua portabilidade, uma vez que não usa recursos elaborados dependentes de arquiteturas específicas. A versão mais atual compreende um único arquivo de código fonte, que foi desenvolvido especificamente para esta aplicação, sem o uso de rotinas adaptadas ou rotinas externas pré-programadas de terceiros, sendo portanto auto suficiente. Apesar de ter sido desenvolvido e testado apenas em ambiente DOS/Windows, por ser auto suficiente e utilizar apenas procedimentos padrão e não específicos para determinadas arquiteturas, deve ser facilmente compilável em outros ambientes.

Pode-se argumentar que o código poderia ser sensivelmente mais rápido se otimizado para sistemas específicos e desenvolvido em baixo nível. De fato, pela natureza das integrações a serem realizadas, envolvendo longas seqüências de cálculos simples, a melhora a princípio seria significativa. A escolha que foi feita de linguagem de alto nível e algoritmos não otimizados se deve ao fato de esta ser a primeira implementação deste modelo, havendo mais interesse em verificar o seu funcionamento do que em ter um código eficiente. Com este objetivo, é mais adequado o desenvolvimento do código em alto nível e de uma forma conceitualmente mais direta. Otimizações e implementações diferentes da aqui desenvolvida foram deixadas como uma etapa futura do trabalho, a ser desenvolvida caso ao aplicar o modelo ao estudo de asteróides haja a necessidade e o interesse em uma otimização do código.

O programa atualmente consiste de um único arquivo executável, que tem como dependências externas apenas os arquivos de dados de entrada e saída e um arquivo de parâmetros que é usado para especificar o funcionamento do programa. A sua execução é feita diretamente pelo arquivo executável, chamado sem a passagem de qualquer parâmetro pela linha de comando (o software é baseado em linha de comando, sem qualquer tipo de informação gráfica sendo exibida). O programa ao ser executado inicialmente lê o arquivo de parâmetros para determinar como ele deve executar o código, e ao realizar a integração exhibe na tela informações sobre

o andamento da integração (algumas delas também selecionáveis pelo arquivo de parâmetros). Estas informações são destinadas apenas para informar o usuário do correto andamento da integração, já que todos os dados de saída vão para arquivos de texto.

Para ilustrar melhor o funcionamento do algoritmo, abaixo está listado um exemplo de arquivo de parâmetros para o programa principal:

Interacting Ellipsoids

Core 15 Parameter File

MKS UNITS ONLY!

Input file (A32)

rot1.ini

Output file (A32)

rot1.var

Constants output file (A32)

rot1.con

Step size (E23.15E3) X

.10000000000000000E-001

Number Of iterations to perform (I8)

00020000

Number Of steps for each record (I8)

00000050

Debug mode (1/0)

0

Integration mode (1/2/3)

1

Integration order (1/2/4)

2

80CAPÍTULO 3. FAZENDO O ASTERÓIDE: IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DO MOF

Variable selection (0/1)

1

File format (4 0/1)

0000

Os arquivos de entrada e saída compartilham o mesmo formato, e um arquivo de saída pode ser utilizado diretamente como arquivo de entrada. Um exemplo de arquivo de entrada/saída está listado abaixo (as colunas que excedem a largura da página foram removidas):

Interacting Ellipsoids Data File

MKS UNITS ONLY!

Number of steps recorded at this file (I8)

1

Number of interacting ellipsoids in this set (I8)

2

Ellipsoids masses, semi-major axis and density constants (5E22.15)

.314159265359000E+14 .100000000000000E+05 .150000000000000E+05 .100000000000000E+05

.314159265359000E+14 .100000000000000E+05 .150000000000000E+05 .100000000000000E+05

Ellipsoids position, speed, quarternion and quarternion derivative vectors (12E21.5)

-.200000000000000E+05 .750000000000000E+04 .000000000000000E+00 .500000000000000E+05

+.200000000000000E+05 -.750000000000000E+04 .000000000000000E+00 -.500000000000000E+05

Como indicado no arquivo, este contém os dados de um sistema de dois elipsóides, com apenas um passo (um ponto no espaço de fase) gravado para este sistema. A porção inicial contém os dados do conjunto de elipsóides, que são constantes no tempo; estes ocupam uma linha para cada elipsóide e cada coluna contém, na ordem em

que estão apresentados: massa (M), semi-eixos principais (a, b, c), densidade no centro (ρ_0) e a constante do potencial de contato (V_0). Na seção seguinte estão listadas as variáveis de cada elipsóide. Cada linha corresponde a um elipsóide, contendo as 12 variáveis que determinam sua posição e velocidade de rotação e translação: a posição do centro (x, y, z), a velocidade de translação do centro ($\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$), as três primeiras componentes dos quatérnions (q_1, q_2, q_3) e suas derivadas ($\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dot{q}_3$). Cada elipsóide tem seus dados listados em uma linha, e ao final delas, dependendo de como está configurada a entrada e saída de dados (pelo arquivo de parâmetros), ao final de cada passo gravado é listada uma linha contendo os valores totais de: energia mecânica, energia cinética, energia potencial, energia cinética de translação, energia cinética de rotação, energia potencial gravitacional, energia potencial de contato, as três componentes do momento linear e as três componentes do momento angular. Esta pode também ser gravada em um arquivo separado (o arquivo de saída das constantes), de forma a facilitar o seu uso posterior. Pode ainda haver uma linha em branco antes da listagem das variáveis do próximo passo registrado no arquivo. A possibilidade de uso de um arquivo de saída diretamente como arquivo de entrada destina-se à continuação de uma integração começada anteriormente; neste caso o programa lê os dados do último passo como condições iniciais e registra os passos seguintes após o último registro do arquivo, continuando-o e resultando em um arquivo indistinguível de um arquivo com o mesmo número de passos gerado de uma única vez.

A formatação a ser usada em todos os dados dos arquivos de parâmetros e de entrada/saída está indicada nos títulos, segundo a notação do FORTRAN: A32 para texto com 32 caracteres, I8 para número inteiro com 8 dígitos, nE22.15 para números reais em notação de ponto flutuante normalizado sendo n colunas com 22 dígitos de largura, dos quais 15 são para a mantissa e o restante para os sinais do número e do expoente, o . (ponto) e o expoente (3 dígitos).

A seguir, o arquivo de parâmetros contém o tamanho do passo no tempo, o número de passos a ser calculado e a amostragem a ser utilizada (o número de passos

após o qual os dados de saída serão gravados). Os últimos parâmetros se referem ao modo de operação do programa: *debug* seleciona um modo de operação em que informações complementares sobre a execução do programa são listadas na tela (que tornam a execução muito mais lenta), cuja utilidade se restringe essencialmente ao desenvolvimento do código; o modo de integração seleciona que conjunto de variáveis é utilizado para integração da rotação: na opção 1 são usados os quatérnions para a rotação e seus momentos ($p = T\dot{q}$) para a velocidade de rotação; na opção 2 são usados os quatérnions para a rotação e sua derivada para a velocidade de rotação; na opção 3 é utilizado o conjunto de variáveis ângulo-vetor (o vetor normalizado que dá o eixo de rotação (\hat{n}) e o ângulo de rotação em torno deste eixo (θ)) para a rotação e suas derivadas para a velocidade de rotação. A diferença dentre estas três opções é discutida mais adiante. As outras opções são a ordem de integração utilizada (ordem 1,2 ou 4, implementada pelo método Runge-Kutta), a seleção da componente do quatérnion a ser eliminada a cada passo, ou a eliminação sempre da quarta componente (como discutido no capítulo anterior), e a última representa a combinação de presença de espaço entre os passos no arquivo de entrada, presença de constantes em cada passo no arquivo de entrada, e sua presença no arquivo de saída, expressas por 0 ou 1. No exemplo, a combinação 0000 indica a ausência de espaços e das constantes tanto no arquivo de entrada como no arquivo de saída.

O funcionamento do programa é bastante simples conceitualmente. Ao ser executado, o programa lê o arquivo de parâmetros para determinar como deve ser o seu funcionamento. Após ler o arquivo de entrada e obter dele os dados constantes do conjunto de elipsóides e suas condições iniciais para a integração o programa utiliza as equações desenvolvidas no capítulo anterior para calcular para cada elipsóide: a aceleração do centro, as variáveis ângulo-vetor e suas derivadas, a derivada primeira e segunda dos quatérnions, os momentos associados a eles e sua derivada temporal. É realizada então a integração da posição e da velocidade, e segundo a escolha feita do modo de integração, a rotação e a nova velocidade de rotação são obtidas. A obtenção da rotação, velocidade de rotação e aceleração da rotação é feita exclusi-

vamente através dos quatérnions e de seu momento. A mudança determinada pelo modo de integração está apenas na seleção se a integração no tempo da rotação e da velocidade de rotação é feita pelos quatérnions e seus momentos, pelos quatérnions e suas derivadas, ou pelas variáveis ângulo-vetor e suas derivadas. Mas realizada a integração o programa volta a trabalhar com os quatérnions, caso na integração tenha sido utilizado um sistema diferente. A gravação e leitura dos dados é feita sempre com os quatérnions e suas derivadas. Este procedimento é realizado em cada passo 1, 2 ou 4 vezes, de acordo com a ordem de integração selecionada. Os testes e comparações dos diferentes métodos desenvolvidos para a integração são discutidos no próximo capítulo.

Após terminado cada passo, o programa verifica se é necessário gravar os dados de saída, de acordo com o intervalo de amostragem selecionado no arquivo de parâmetros, após o que os dados de saída deste passo são tomados como condição inicial do próximo passo e todo o processo é repetido até que o programa alcance o número de passos desejado.

Os dados de saída na formatação apresentada podem ser facilmente importados para programas gráficos ou de análise estatística, de forma a permitir uma melhor visualização e interpretação dos resultados da integração. O programa desenvolvido tem como saída de dados apenas estes arquivos contendo os dados dos conjuntos de elipsóides e seu estado em cada passo, de forma tabular, não havendo qualquer outra forma imediata de sua visualização incorporada ao código desenvolvido. Como todos os parâmetros de sua execução são passados ao programa pelo seu arquivo de parâmetros, uma vez editado o conteúdo do arquivo de parâmetros a execução do programa segue autonomamente, de forma completamente não interativa.

Adicionalmente, para facilitar a visualização dos resultados da integração, foi desenvolvido um outro programa, cuja função é ler arquivos de saída gerados pelo integrador e a partir deles selecionar uma amostragem regular de um número de pontos do espaço de fase determinado pelo usuário. Estes pontos selecionados são convertidos em um *script* para execução no software 3D Studio Max. Este *script*, ao

ser executado, cria um conjunto de elipsóides com o tamanho e forma especificados pelo arquivo de saída da integração, e para cada um dos pontos especificados cria um novo quadro na animação e ajusta a posição do centro e a orientação espacial de cada elipsóide conforme o resultado da integração. É então gerada de forma quase que automática uma animação mostrando o resultado da integração realizada. Após terminada a integração numérica, para gerar a animação tudo que é necessário do usuário é executar o gerador de scripts, especificando o arquivo contendo os dados de interesse, o arquivo de script a ser gerado, e o número de quadros desejados na animação. Posteriormente é necessário apenas executar este script no 3D Studio, e a animação é gerada. A desvantagem deste procedimento para criação de animações é, obviamente, a necessidade de um software externo. A escolha do 3D Studio Max se baseou principalmente na ampla variedade de recursos disponíveis, permitindo controlar de forma bastante precisa a criação de animações complexas, sendo os recursos mais importantes para a sua escolha a possibilidade de uso de scripts para controle de todas as suas funções e o suporte já incluído no software para quatérnions (ele suporta ainda outros sistemas de representação de rotação, como ângulos de Euler e variáveis ângulo-vetor). A Figura 3.1 mostra a interface do 3D Studio Max. Alguns exemplos de gráficos e imagens gerados com os dados de saída estão no próximo capítulo, nas discussões dos sistemas utilizados para teste do modelo.

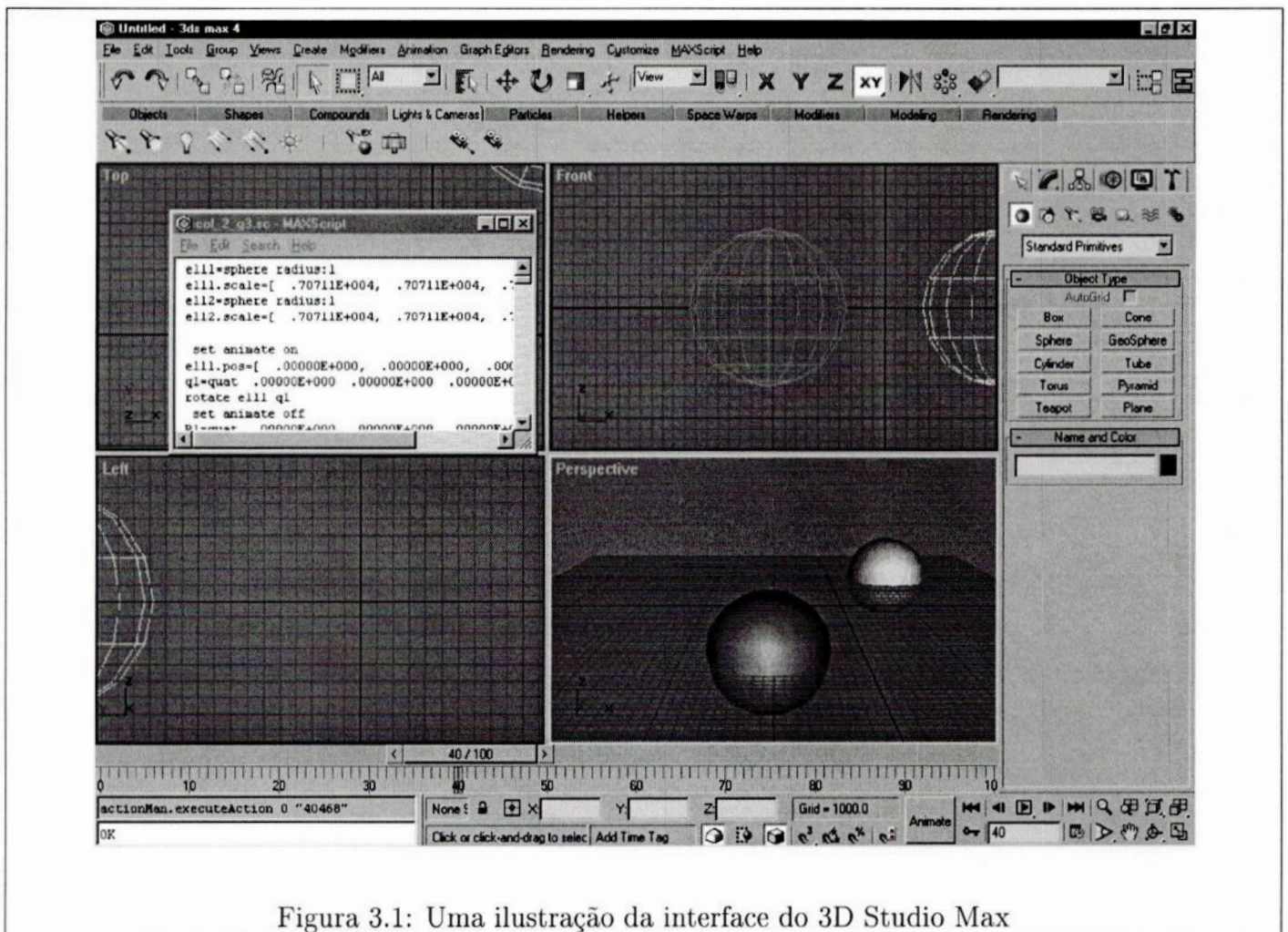


Figura 3.1: Uma ilustração da interface do 3D Studio Max

Capítulo 4

Testando o Asteróide: Análise do Modelo

Após ter o modelo desenvolvido e implementado computacionalmente, é possível então realizar uma análise do funcionamento do modelo, para verificar se de fato ele se comporta da forma esperada. Esta análise é necessária principalmente para verificar a sua correta implementação, eliminando erros de programação.

Esta análise foi feita basicamente verificando o código e o algoritmo utilizados, e, principalmente, ao utilizar o software desenvolvido para realizar integrações numéricas de sistemas simples, que tenham solução analítica conhecida ou para os quais se conheça algumas propriedades que devem ser apresentadas, a fim de verificar se o resultado do programa corresponde ao que se espera.

Outro objetivo destes testes foi verificar a sensibilidade da precisão dos resultados e a variação do tempo gasto nas integrações ao mudar a ordem de integração utilizada e o tamanho do passo, de forma a poder determinar quais são os parâmetros mais convenientes a utilizar, já que há sempre um compromisso entre precisão numérica e tempo gasto. Pela natureza do programa desenvolvido, o gasto de memória é sempre reduzido, pois são mantidas na memória apenas as variáveis do passo atual. E como a gravação de dados de saída corresponde apenas às 12 variáveis de cada

fragmento, e a gravação não necessariamente é feita em todos os passos (pode-se usar apenas uma amostragem), o acesso a disco também é reduzido, havendo uma grande influência no tempo gasto apenas caso se use uma amostragem que exija gravações muito freqüentes (mais que uma vez a cada 10 passos). Assim, o principal determinante do tempo necessário para as integrações é o processador utilizado. Todos os valores aqui indicados de tempo gasto foram obtidos em um Pentium II 300MHz, 160Mb RAM, utilizando o programa em uma sessão DOS dentro de Windows 98. Como há ainda uma grande variação no tempo gasto de acordo com as opções de compilação do programa e outros fatores de software, é importante lembrar que os valores aqui listados são mais importantes para comparação entre si (pois foram feitos nas mesmas condições) que de forma absoluta.

Para facilitar a identificação de eventuais problemas, a verificação das simulações foi feita por partes, partindo das mais elementares. Em todos os testes foi verificada a conservação da energia mecânica total, do momento linear total e do momento angular total, que sabe-se que devem sempre ser constantes em sistemas isolados, por mais complexos (e não integráveis) que sejam. Não havendo erros no desenvolvimento matemático nem na sua implementação, estas grandezas devem variar apenas pelo erro (inevitável) derivado da precisão numérica limitada do computador. Este erro, devido aos arredondamentos em cada cálculo, é aceitável se for pequeno, e para reduzi-lo foi utilizada sempre precisão dupla (representação dos números por 8 bytes) em todos os cálculos. Caso não haja erros sistemáticos, estes erros de arredondamento devem ser aleatórios, de média nula e de variância constante, ou seja, devem ser apenas ruído branco. Todas as informações aqui relacionadas de variação destas constantes são dadas em termos de valores relativos, de forma a não ser necessário considerar suas unidades, e ser possível uma comparação mais direta.

O que é considerado um erro pequeno é algo que varia com a aplicação. Como este modelo deve ser utilizado principalmente para análises estatísticas e com dados que têm erros relativos de medida da ordem de 10^{-3} a 10^{-1} , consideramos que em geral o maior erro aceitável seria uma variação de 10^{-3} ao final da integração, e

que com o passo de integração escolhido os resultados não mudem sensivelmente ao diminuir o passo ou realizar pequenas variações nas condições iniciais (a definição de o que se trata de uma mudança sensível depende do problema, já que nos sistemas mais caóticos só é possível (se possível) falar neste tipo de estabilidade da solução ao considerar suas propriedades gerais, já que os resultados (o movimento) obtidos diretamente vão ser sensíveis às condições iniciais, ao passo de integração e à precisão de cálculo do hardware e do software empregados). Também por este motivo escolhemos para os testes do modelo apenas sistemas simples.

4.1 Translação sem rotação e sem contato

Inicialmente foi verificada a correta integração para um movimento livre de um único corpo na ausência de rotação. Este teste destina-se não apenas a verificar a correta integração da translação, mas também à verificação do integrador e dos procedimentos de leitura, processamento e gravação dos dados. O resultado (como deve ser necessário para um sistema tão simples, caso se espere que os mais complexos sejam integrados razoavelmente) foi o correto movimento e conservação das constantes de movimento a uma alta precisão. Este teste é importante também para revelar o limite inferior de erro possível de ser obtido, pois é o sistema no qual há menos fontes de erro. Assim, estes valores para a desconservação das constantes são os melhores possíveis a serem esperados da implementação deste modelo com a combinação software / hardware utilizada.

O movimento obtido foi retilíneo com velocidade constante, e a energia total e o momento linear total se conservaram de forma exata no limite da precisão do computador (na precisão do computador, sua variação foi nula). Este resultado foi observado ao integrar em primeira e segunda ordem, e é independente do passo de integração. Assim, conclui-se que estes procedimentos mais simples estão sendo muito bem realizados pelo programa.

Para verificar o correto tratamento da força gravitacional e o movimento não

uniforme em 3 dimensões, foram realizados testes integrando o problema de dois corpos. Os corpos foram colocados a distâncias muito maiores que seus tamanhos, de forma que a força de contato não se manifeste. Apenas como referência, os valores de massas, distâncias e velocidades iniciais foram escolhidos próximos aos valores do sistema Sol-Terra. A trajetória corresponde visualmente à esperada. Para integrações de segunda ordem, a conservação das constantes de movimento também se deu de forma excelente. A partir de 10^5 passos por órbita, as variações na energia, momento angular e linear eram todas características de ruído branco, de amplitude relativa da ordem de 10^{-13} (energia) e 10^{-14} (momento angular e linear), como representado nas Figuras 4.1, 4.2, 4.3. Foi verificado também que a grandeza de conservação mais difícil é a energia total, e a mais facilmente conservada é o momento linear: com 10^4 passos por órbita a energia varia apenas em 10^{-12} , mas esta variação é bastante regular e periódica; o momento angular varia de 10^{-14} , mas cresce linearmente com o tempo; o momento linear tem apenas um ruído branco de amplitude 10^{-14} . Com passos excessivamente grandes (100 por órbita) as variações na energia, momento angular e linear são um crescimento linear, chegando a 10^{-5} . Em primeira ordem o comportamento é semelhante, com a diferença de mais tempo de computação ser necessário para atingir os mesmos valores de erro.

Utilizamos também este sistema para verificar a variação do tempo gasto com a ordem da integração e com o tamanho do passo. O tempo necessário para realização da integração foi, em segunda ordem, cerca de 3.2ms por passo, e em primeira ordem 1.9ms por passo, embora deva ser notado que este tempo é fortemente dependente da amostragem utilizada. Pode-se argumentar com base nestes resultados que o software é muito lento, uma vez que são necessários 10^5 passos por órbita para integrar de forma precisa o sistema Sol-Terra. De fato, este integrador seria muito ineficiente como integrador de órbitas em longos períodos. Mas o interesse deste trabalho é fragmentações, que se dão em uma escala de tempo muito menor que um período orbital. Uma indicação melhor da escala de tempo necessária aos nossos estudos se dará pelas simulações de colisão, discutidas mais adiante.

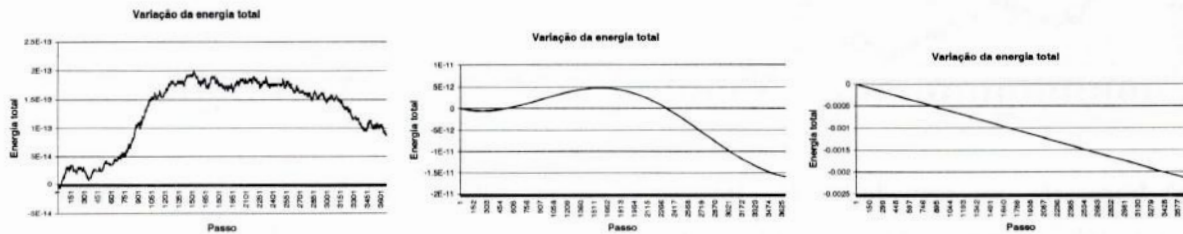
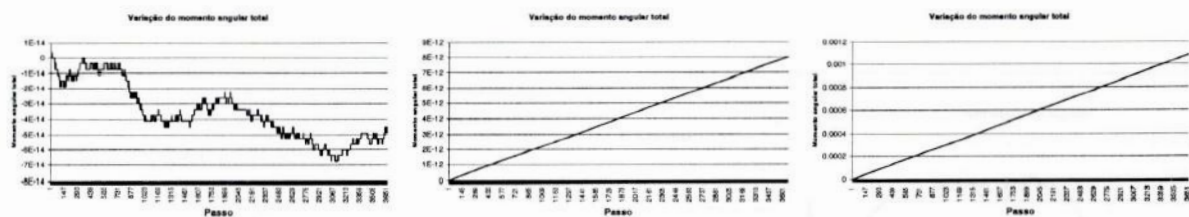
(a) Integração em segunda ordem, 10^5 passos por órbita(b) Integração em segunda ordem, 10^4 passos por órbita(c) Integração em primeira ordem, 10^4 passos por órbita

Figura 4.1: Variação da energia mecânica total em um sistema de dois corpos interagindo apenas gravitacionalmente, em uma órbita elíptica. Observa-se que as três integrações apresentam erros pequenos para a energia, e que na primeira o erro é do tipo ruído branco, na segunda é regular e periódico, e na terceira o erro é linear. Cada gráfico cobre uma integração de uma órbita completa, e todas elas têm o mesmo período, de forma que cada passo no gráfico (a) corresponde a 100 passos de integração, e cada passo em (b) e (c) corresponde a 10 passos de integração.

(a) Integração em segunda ordem, 10^5 passos por órbita(b) Integração em segunda ordem, 10^4 passos por órbita(c) Integração em primeira ordem, 10^4 passos por órbita

Figura 4.2: Variação do momento linear total para as mesmas integrações da Figura 4.1.



(a) Integração em segunda ordem, 10^5 passos por órbita

(b) Integração em segunda ordem, 10^4 passos por órbita

(c) Integração em primeira ordem, 10^4 passos por órbita

Figura 4.3: Variação do momento angular total para as mesmas integrações da Figura 4.1.

Desta forma, estes testes já indicam um bom funcionamento do programa para a parte mais simples do código, que consiste de movimento sem rotação, sujeito apenas à gravidade. Resta verificar, em ordem de complexidade, a atuação da força de contato, a rotação e a transferência de momento angular entre translação e rotação.

4.2 Translação sem rotação com contato

Para verificar a atuação da força de contato ainda sem envolver a rotação, utilizamos sistemas de corpos esféricos sem rotação. Nestes sistemas foram realizadas colisões entre esferas a variados parâmetros de impacto e velocidades, de forma a verificar, principalmente, se a força de contato que criamos se comporta da forma esperada. Para que esta força de contato seja razoável, queremos que gere uma força nula ou desprezível quando os corpos não estão em contato, e que quando eles entrem em contato a força seja tal que eles não se penetrem consideravelmente. O ideal a ser esperado seria que esta força atue de forma impulsiva, apenas mudando a velocidade no momento do toque dos dois corpos. Para facilitar a sua visualização e análise, estas colisões foram feitas todas em um plano (xy). Para todos estes testes, foram utilizados esferas de 10Km de raio, e densidades no centro de $5g/cm^3$, com velocidades de colisão de 1.6Km/s.

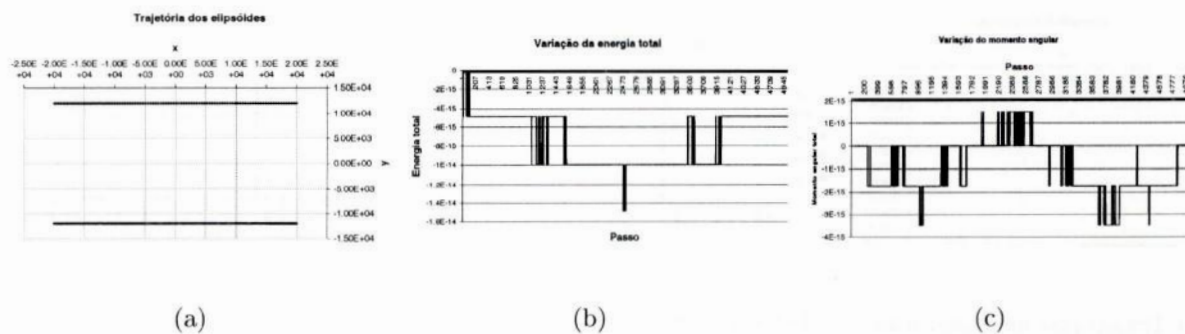


Figura 4.4: Integração em segunda ordem, com 5000 passos (consumindo 7ms por passo), de um encontro próximo de dois elipsóides.

As Figuras 4.4, 4.5, 4.6 representam as trajetórias dos corpos nestas colisões e as variações na energia e no momento angular total. A primeira integração corresponde a um sistema onde os elipsóides passam próximos, mas sem se encontrar. A energia só variou por 10^{-14} , de forma semelhante ao ruído branco, assim como o momento angular total. O momento linear total, nulo, se manteve nulo até o limite de precisão dos cálculos. O resultado, muito bom, foi que eles continuaram em suas trajetórias retilíneas, sem que o potencial de contato os desviasse.

A segunda integração corresponde a uma colisão frontal. As trajetórias estão corretas, e o momento linear e angular total, ambos nulos, se mantiveram nulos por toda a integração. Como representado na figura 4.5, a energia total tem um salto no momento do impacto, voltando depois para um valor próximo ao inicial. O máximo deste pico foi de 10^{-3} para 5000 passos, e 10^{-5} para 50000 passos. A diferença da energia final para a inicial foi de 10^{-4} para 5000 passos e 10^{-7} para 50000 passos. Em todas as colisões foi verificado este comportamento da energia no instante da colisão, mantendo estas mesmas características para qualquer passo de integração, mas sempre diminuindo com o passo, de forma aproximadamente proporcional a δt^{-2} . Este resultado na verdade já pode ser esperado ao se considerar o tipo de potencial utilizado. Como este potencial cresce rapidamente no momento do impacto, a imprecisão do cálculo deve sempre gerar um erro deste tipo.

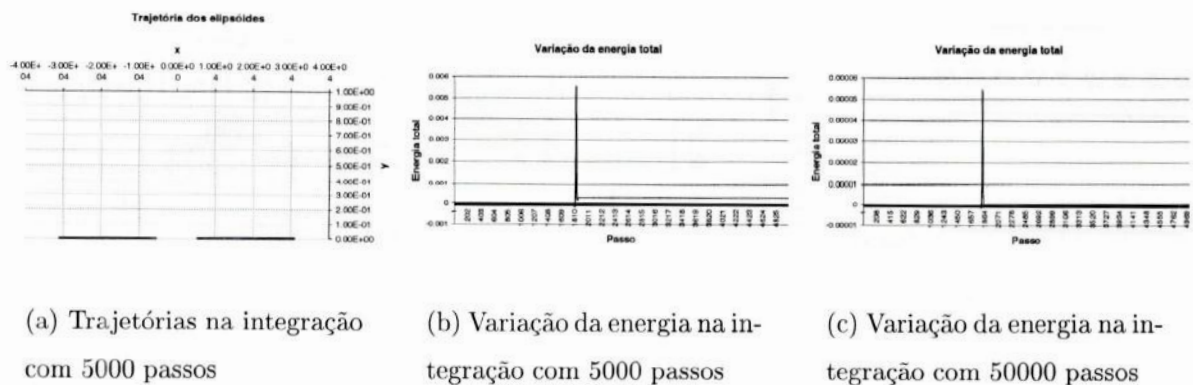


Figura 4.5: Integração em segunda ordem, de uma colisão frontal dos mesmos elipsóides do sistema da Figura 4.4.

A terceira integração foi desta mesma colisão com um parâmetro de impacto não nulo. O comportamento é da forma esperada para colisões elásticas de corpos de baixa massa (de forma que sua atração gravitacional seja desprezível na escala de tempo destas colisões). Vê-se (Figura 4.6) que as trajetórias são retas, que mudam de forma essencialmente instantânea a sua orientação no momento da colisão. A conservação das constantes teve o mesmo comportamento do sistema anterior. A Figura 4.7 mostra a energia cinética, potencial gravitacional e potencial de contato ao longo do tempo para este sistema.

Este tipo de teste também permite obter informações sobre a definição do raio de cada esfera. Como discutido anteriormente, sendo a densidade de cada corpo uma gaussiana, ela se estende ao infinito, sendo necessário definir um critério para determinar a extensão de cada elipsóide. O critério mais simples se trata de considerar os limites de cada corpo em função do desvio padrão da sua gaussiana, mas a escolha de que valor (em geral proporcional ao desvio padrão) será utilizado é arbitrária.

Estas colisões dão uma forma mais natural de definir a extensão de cada corpo, ao verificar a distância mínima a que chegam nas colisões e como ela depende da energia do impacto: a extensão de cada corpo pode ser definida pela distância mínima que ele alcança dos outros na colisão. A variação desta distância mínima

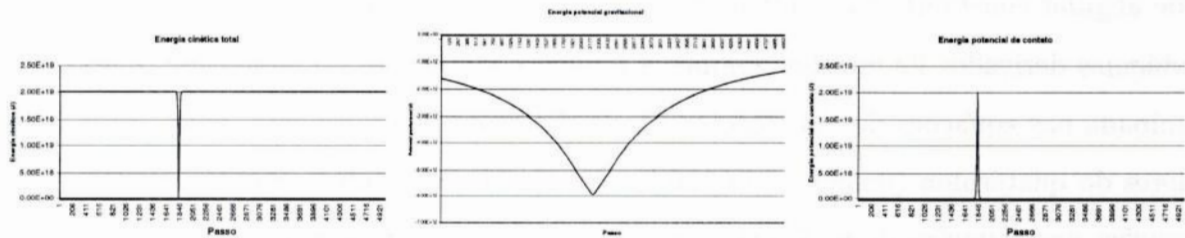


(a) Trajetórias na integração com 5000 passos

(b) Variação da energia na integração com 5000 passos

(c) Variação da energia na integração com 50000 passos

Figura 4.6: Integração em segunda ordem, de uma colisão dos mesmos elipsóides do sistema da Figura 4.4.



(a)

(b)

(c)

Figura 4.7: Energia cinética (a), potencial gravitacional (b) e de contato (c) do sistema da Figura 4.6 para a integração com 5000 passos. Pode-se observar que a energia gravitacional tem uma variação 10^7 vezes menor que o potencial de contato, o que indica que sua ação de fato foi desprezível neste sistema.

com a energia do impacto (frontal), mostra que é razoável utilizar este valor para a extensão de cada corpo, uma vez que ao aumentar a energia de impacto de um fator de 10^6 (velocidade de impacto de 1600Km/s), a distância mínima diminuiu apenas de 10955m para 9490m (um fator de 10^{-1}).

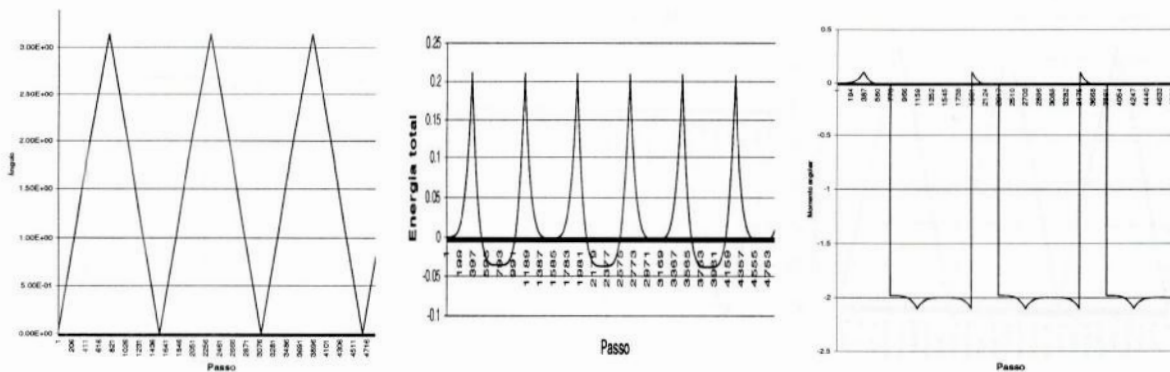
Assim, estes testes validam fortemente a nossa definição para o potencial de contato, indicando não apenas que no modelo desenvolvido a força de contato foi bem modelada, mas também que este potencial foi corretamente implementado no nosso código.

4.3 Rotação sem translação e sem contato

Para verificar a rotação, a parte mais problemática do modelo, iniciamos com testes de rotações livres, para posteriormente realizar colisões com transferência de momento angular.

O teste mais imediato para a rotação, o de um corpo isolado em torno de um eixo principal de inércia - cujo resultado deve ser simplesmente uma rotação com velocidade angular constante em torno de um eixo fixo -, foi o que permitiu encontrar os problemas derivados de escolher sempre a mesma componente do quatérnion a ser eliminada nas equações de movimento. Como discutido anteriormente, para certos valores do quatérnion (quando a variável a ser eliminada é nula) ocorrem indeterminações nas equações de movimento. Por esta razão implementamos a escolha da variável a ser eliminada em cada passo, de forma a eliminar sempre a componente de maior módulo (pelo vínculo da normalização do quatérnion a componente de maior módulo tem módulo entre $\frac{1}{2}$ e 1). Sem que seja utilizada a seleção de variável não foi possível obter resultados razoáveis para rotação caso fossem atingidos grandes ângulos (a partir de 3).

Resolvido este problema de seleção de variável, a rotação deixou de apresentar grandes problemas, apresentando o movimento correto, como mostrado nas Figuras 4.8 e 4.9. A conservação da energia cinética e do momento angular já teve erros



(a) Ângulo de rotação ao longo do tempo, apresentando a forma correta.

(b)

(c)

Figura 4.8: Integração com 50000 passos de uma rotação livre, através dos quatérnions e seus momentos. Notar que como o ângulo de rotação é limitado a $0 < \theta < \pi$, ao atingir π o eixo de rotação é invertido e o ângulo deve passar a decrescer.

sistemáticos, pois as variações mostradas nestes gráficos são as mesmas ao se variar o tamanho do passo. No entanto, outros resultados anteriores e uma implementação independente do código realizada por T. Kodama mostram que o modelo leva a uma conservação adequada da energia e do momento angular. Desta forma, como também é indicado ao observar que o ângulo de rotação varia corretamente ao longo do tempo (Figura 4.8(a)), este problema na conservação da energia está em um algum erro de código na última versão existente do programa, no qual estamos trabalhando para sua correção.

4.4 Colisão com rotação

Finalmente, verificamos a correta integração de uma colisão de corpos assimétricos com parâmetro de impacto não nulo. O resultado (Figura 4.10) mostra que as trajetórias foram integradas corretamente, assim como a rotação, com os dois elipsóides

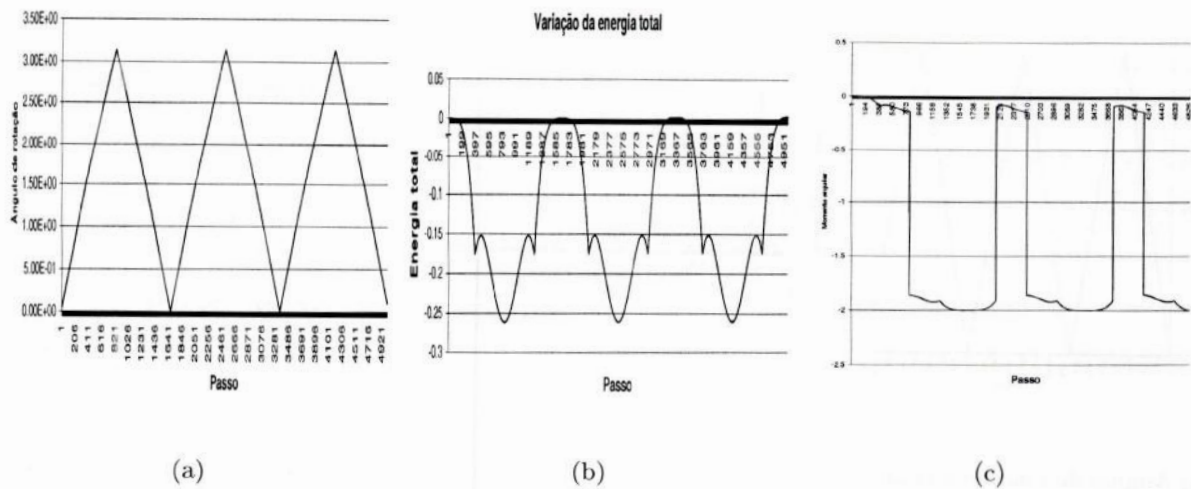


Figura 4.9: A mesma integração da Figura 4.8, mudando apenas o modo de integração, para utilizar os quatérnions e suas derivadas.

sem rotação até o seu encontro, e passando a girar com velocidade constante após o impacto. A variação na energia total e no momento angular tem a mesma característica da simulação anterior.

As simulações de rotação e de impactos foram também analisadas de forma qualitativa ao criar animações tridimensionais com os dados resultantes da integração. Estas animações são úteis para analisar o resultado de sistemas para os quais não se conhece uma solução analítica, mas tem-se uma idéia qualitativa de como deve ser o movimento de cada corpo. Nestes sistemas (como colisões de muitos corpos) a única informação que pode ser analisada quantitativamente é a conservação das constantes de movimento. Assim, a observação do movimento nas animações permite ter uma idéia melhor de o quão razoáveis são os resultados obtidos.

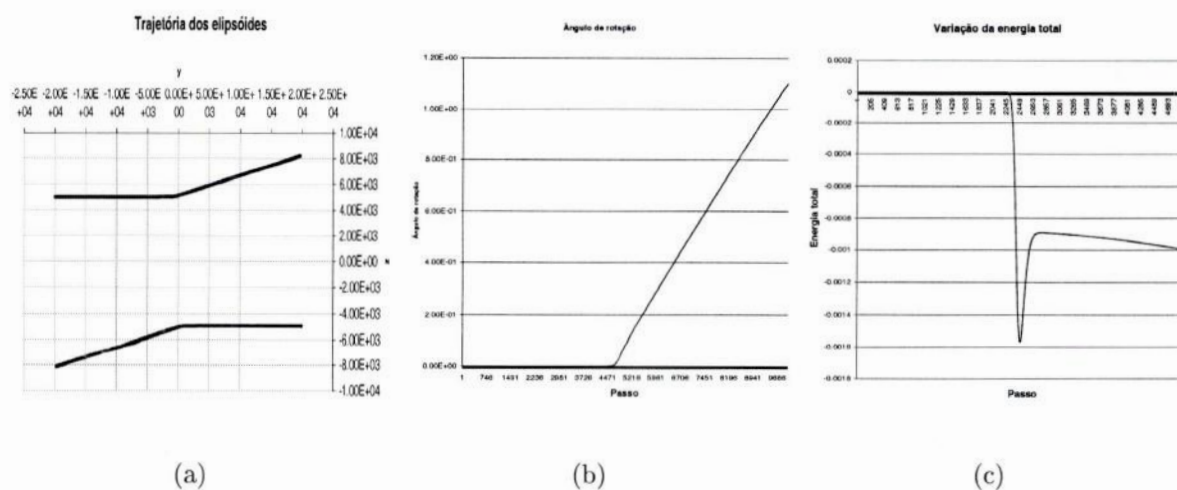


Figura 4.10: Integração de uma colisão de dois elipóides com parâmetro de impacto não nulo. Foram utilizadas 50000 passos, consumindo cerca de 2.9ms por passo.



Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas Futuras

Após implementado, o modelo desenvolvido neste trabalho foi extensivamente testado, para assegurar o correto funcionamento de todas as suas partes. Os testes realizados com sistemas de solução conhecida indicaram um bom funcionamento geral do código. Foi obtida uma precisão excelente para o tratamento da translação, da gravidade e do potencial de contato. Os testes com a rotação indicaram uma integração razoável, embora haja ainda indicação de que algumas correções são necessárias para que a rotação seja processada de forma tão precisa quanto o restante.

Um dos resultados já obtidos foi a validação do potencial de contato que definimos. Como explicado anteriormente, é difícil obter modelagens para forças de contato, o que nos levou a definir uma nova representação para o seu potencial. E o resultado dos testes realizados indicou um comportamento muito bom deste potencial de contato, apresentando todas as propriedades desejadas e com uma alta precisão.

Estes resultados indicam que o modelo e o código desenvolvidos comportam-se bem fisicamente, ou seja, que o processamento do sistema de elipsóides interagentes representado por este modelo gera um resultado fisicamente correto. Falta verificar se o modelo físico aqui desenvolvido de fato é adequado para o estudo de asteróides. Esta aplicação para asteróides ainda não foi realizada, constituindo um dos principais trabalhos a serem realizados no futuro.

Outra possibilidade de trabalho futuro está na implementação de melhorias a esta modelagem. Já estamos trabalhando na inclusão de atrito, através de uma função de dissipação de Rayleigh, que tem como principal característica preservar o momento angular e ter efeito nulo quando a rotação do sistema é de corpo rígido. Outras possibilidades sendo consideradas são a inclusão de forças de coesão e da possibilidade de ruptura dos fragmentos existentes.

Estamos também trabalhando em programas acessórios para as integrações. Um deles tem a função de gerar as condições iniciais para um corpo reacumulado, evitando que ele tenha que ser "montado" pelo usuário: da forma como está implementado o modelo é necessário dar as condições iniciais de cada elipsóide; desta forma, se for desejada uma integração de um sistema com corpos reacumulados é necessário dar todas as posições e velocidades, de cada fragmento. O programa sendo desenvolvido monta um corpo reacumulado a partir de um conjunto de elipsóides, procurando uma configuração que minimize a energia e tenha rotação de corpo rígido, de forma a fornecer as condições iniciais desejadas.

Estes trabalhos atualmente em andamento e os a serem iniciados constituem o projeto de mestrado que dará continuidade ao trabalho aqui desenvolvido.

Referências

Alfvén, H. 1964. On the origin of asteroids. *Icarus* **3**, 52-56.

Angeli, C.A. 1995. Determination des propriétés rotationnelles d'astéroïdes: des indices pour interpréter leur histoire évolutive. Thèse de doctorat, Observatoire de Paris.

Bell, J.F., Davis, D.R., Hartmann, W.K. e Gaffey, M.J. 1989. Asteroids: The big picture. Em *Asteroids II*, eds. Richard P. Binzel, Tom Gehrels e Mildred Shapley Matthews. Tucson: University of Arizona Press. pp. 921-945.

Benz, W. e Asphaug, E. 1994. Impact simulations with fracture. I. Methods and tests. *Icarus* **107**, 98-116.

Benz, W. e Asphaug, E. 1999. Catastrophic disruptions revisited. *Icarus* **142**, 5-20.

Binzel, R.P., Farinella, P., Zappalà, V. e Cellino, A. 1989. Asteroid rotation rates: Distribution and statistics. Em *Asteroids II*, eds. Richard P. Binzel, Tom Gehrels e Mildred Shapley Matthews. Tucson: University of Arizona Press. pp. 416-441.

Brouwer, D. e van Woerkom, A.J.J. 1950. The secular variations of the orbital

elements of the principal planets. *Astron. Papers Amer. Ephem.* **13**, 81-107.

Bowell, E., Chapman, C.R., Gradie, J.C., Morrisson, D. e Zellner, B. 1978. Taxonomy of asteroids. *Icarus* **35**, 313-335.

Bowell, E. 2002. The asteroid orbital elements database. <ftp://ftp.lowell.edu/pub/elgb/astorb.htm>.

Carvano, J.M., 2002. Taxonomia e mineralogia de asteróides. Tese de doutorado, Observatório Nacional.

Chapman, C.R. e Davis, D.R. 1975. Asteroid collisional evolution: evidence for a much larger early population. *Science* **190**, 553-556.

Chapman, C.R., Morrisson, D. e Zellner, B. 1975. Surface properties of asteroids: A synthesis of polarimetry, radiometry, and spectrophotometry. *Icarus* **25**, 104-130.

Chapman, C.R., Paolicchi, P., Zappalà, V., Binzel, R.P. e Bell, J.F. 1989. Asteroid families: Physical properties and evolution. Em *Asteroids II*, eds. Richard P. Binzel, Tom Gehrels e Mildred Shapley Matthews. Tucson: University of Arizona Press. pp. 386-415.

Davis, D.R. e Ryan, E.V. 1990. On collisional disruption: experimental results and scaling laws. *Icarus* **83**, 156-182.

Davis, D.R., Ryan, E.V. e Hartmann, W.K. 1991. Impact experiments 3: Catastrophic fragmentation of aggregate targets and relation to asteroids. *Icarus* **94**, 283-298.

Dermott, S.F. e Murray, C.D. 1982. Asteroid rotation rates depend on diameter and type. *Nature* **296**, 418-421.

Dermott, S.F., Harris, A.W. e Murray, C.D., 1984. Asteroid Rotation Rates. *Icarus* **57**, 14-34.

Farinella, P., Paolicchi, P. e Zappalà, V. 1981. Analysis of the spin rate distribution of asteroids. *Astron. Astron. Astrophys.* **104**, 159-165.

Farinella, P., Paolicchi, P. e Zappalà, V. 1982. The asteroids as outcomes of catastrophic collisions. *Icarus* **52**, 409-433.

Ferraz-Mello, S. 1999. Slow and fast diffusion in asteroid-belt resonances: a review. *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy* **73**, 25-37.

Fujiwara, A., Cerroni, P., Davis, D.R., Ryan, E.V., Di Martino, M., Holsapple, H. e Housen, K. 1989. Experiments and scaling laws for catastrophic collisions. Em *Asteroids II*, eds. Richard P. Binzel, Tom Gehrels e Mildred Shapley Matthews. Tucson: University of Arizona Press. pp. 240-265.

Gil-Hutton, R. e Brunini, A. 1999. Collisional evolution of the early asteroid belt. *Planetary and Space Science* **47**, 331-338.

Gradie, J.C., Chapman, C.R. e Williams, J.G. 1979. Families of Minor Planets. Em *Asteroids*, ed. Tom Gehrels. Tucson: University of Arizona Press. pp. 269-390.

Guimarães, T.A.G. 2001. Determinação do período de rotação de alguns asteróides através de observações fotométricas. Projeto de Final de Curso, Observatório do Valongo.

Hamilton, Sir W.R. 1866. *Elements of Quaternions*. London: Longmans, Green and Co.

Harris, A.W. 1979. Asteroid rotation rates. *Icarus* **40**, 145-153.

Hirayama, K. 1918. Groups of asteroids probably of common origin. *Astron. J.* **31**, 185-188.

Knežević, Z. 1994. Asteroid proper elements: Past and present. Em *Seventy-five years of Hirayama asteroid families*, eds. Yoshihide Kozai, Richard P. Binzel e Tomohiro Hirayama. Astronomical Society of the Pacific Conference Series, **63**, 129-139.

Kozai, Y. 1994. Kiyotsugu Hirayama and his families of Asteroids. Em *Seventy-five years of Hirayama asteroid families*, eds. Yoshihide Kozai, Richard P. Binzel e Tomohiro Hirayama. Astronomical Society of the Pacific Conference Series, **63**, 1-6.

Milani, A., e Knežević, Z. 1994. Asteroid proper elements and the dynamical structure of the asteroid main belt. *Icarus* **107**, 219-254.

Murray, C.D. e Dermott, S.F. 1999. *Solar System Dynamics*. London: Cambridge University Press.

Nakamura, A. e Fujiwara, A. 1991. Velocity distribution of fragments formed in a simulated collisional disruption. *Icarus* **92**, 132-146.

Pravec, P. e Harris, A.W., 2000. Fast and slow rotation of asteroids. *Icarus* **148**, 12-20.

Ryan, E.V., Hartmann, W.K. e Davis, D.R. 1991. Impact experiments 3: Catastrophic fragmentation of aggregate targets and relation to asteroids. *Icarus* **94**, 283-298.

Safronov, V. 1969. Evolution of the protoplanetary cloud and formation of the Earth. Moskow: Nauka, eds.

Tedesco, E.F. e Zappalà, V. 1980. Rotational properties of asteroids: Correlations and selection effects. *Icarus* **43**, 285-293.

Tholen, D. 1984. Asteroid taxonomy from cluster analysis of photometry. Ph.D. thesis, University of Arizona.

Weindenschilling, S.J. 1977. The distribution of mass in the planetary system and solar nebula. *Astrophysics and Space Sciences* **51**, 153-158.

Williams J.G. 1979. Proper elements and family membership of the asteroids. Em *Asteroids*, ed. Tom Gehrels. Tucson: University of Arizona Press. pp. 1040-1063.

Williams, J.G. 1989. Asteroid family identifications and proper elements. Em *Asteroids II*, eds. Richard P. Binzel, Tom Gehrels e Mildred Shapley Matthews. Tucson: University of Arizona Press. pp. 1043-1072.

Williams, J.G. 1992. Asteroid families - An initial search. *Icarus* **96**, 251-280.

Wisdom, J. 1982. The origin of the Kirkwood gaps: A mapping for asteroidal motion near the 3/1 commensurability. *Astron. J.* **87**, 577-593.

Wisdom, J. 1983. Chaotic behavior and the origin of the 3/1 Kirkwood gap. *Icarus* **56**, 51-74.

Wisdom, J. 1991. Symplectic maps for the N-body problem. *Astron. J.* **102**, 1528-1538.

Zappalà, V., Farinella, P., Knežević, Z. e Paolicchi, P. 1984. Collisional origin of the asteroid families: Mass and velocity distributions. *Icarus* **59**, 261-285.

Zappalà, V., Cellino, A., Farinella, P. e Knežević, Z. 1990. Asteroid families. I. Identification by hierarchical clustering and reliability assessment. *Astron. J.* **100**, 2030-2046.

Zappalà, V. e Cellino, A. 1994. Asteroid families. Em *Asteroids, Comets and Meteors 1993*, eds. A. Milani, M. Di Martino e A. Cellino. Houston: Lunar Planetary Institute. pp 395-414.

Zappalà, V., Bendjoya, P., Cellino, A. e Farinella, P. e Froeschlé, C. 1995. Asteroid families: a search for 12487-asteroid sample using two different clustering techniques. *Icarus* **106**, 291-314.