

Métodos Computacionais da Física B

Agenor Hentz & Leonardo Brunnet
Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS
Instituto de Física
Porto Alegre - RS

Lista de Figuras

1.1	Região de estabilidade para o método de Euler explícito. . . .	17
1.2	Região de estabilidade para os métodos RK2 e RK4.	28
2.1	Mapa logístico, com $\lambda = 0,4$	40
2.2	Mapa logístico em função do tempo discreto t para valores iniciais $x_0 = 0, 1; 0, 5$ e $0, 9$ e $\lambda = 0, 1$ e $0, 2$	41
2.3	Mapa logístico em função do tempo discreto t para valores iniciais $x_0 = 0, 1; 0, 5$ e $0, 9$ e $\lambda = 0, 3$ e $0, 6$	42
2.4	Mapa logístico em função do tempo discreto t para valores iniciais $x_0 = 0, 25$ e $\lambda = 0, 8$ e $0, 88$	44
2.5	Mapa logístico em função do tempo discreto t para $\lambda = 0, 8$. Também estão ilustradas as curvas $y = x$ e $y = f(f(x))$. Podemos notar a presença de um ponto-fixo de primeira-ordem instável (que ocorre quando $f(x) = x = 0, 6875$, na interseção entre as 3 curvas) e dois pontos fixos de segunda ordem (que ocorrem em $f(f(x)) = x = 0, 513045$ e $0, 799455$, que ocorrem na interseção de $f(f(x))$ e $y = x$).	45
2.6	Valores assintóticos de x para diferentes valores de λ . O gráfico apresenta os últimos 400 pontos calculados por λ , depois de calcular 700 pontos. Os valores de λ variam de $0, 72$ até 1 , em uma malha de 400 valores.	46
2.7	Mapa do tipo teia para o valor inicial $x_0 = 0, 5$ $\lambda = 0, 2$	47
2.8	Mapa de recorrência para o valor inicial $x_0 = 0, 5$ $\lambda = 0, 895$. Neste caso $\epsilon = 10^{-5}$	48

- 2.9 Coeficiente de Lyapunov como função de λ . Coeficiente calculado para $x_0 = 0.5$, para séries até $n=700$ desprezando-se os primeiros 300 valores de x_n . O coeficiente λ foi calculado para 400 valores diferentes, igualmente espaçados entre $\lambda = 0,72$ e $\lambda = 1$ 49
- 3.1 Sequência de números aleatórios entre 1 e 9, mostrando a região da cauda, a região cíclica. O período desta sequência é $L + C = 7$ 55
- 3.2 Exemplo de caminhos seguidos por 5 diferentes caminhantes aleatórios, inicialmente na origem e com igual probabilidade de darem um salto com $l = 1$ para frente ou para trás. Foram contabilizados os primeiros 100 passos para cada caminhante 67

Sumário

1	Equações Diferenciais Ordinárias	7
1.0.1	Condições para Existência de Solução	7
1.0.2	Estabilidade da Solução	9
1.0.3	Solução Numérica	11
1.1	Método de Euler	11
1.1.1	Método de Euler Explícito	12
1.1.2	Método de Euler Implícito	12
1.1.3	Análise da Estabilidade do Método de Euler	14
1.2	Método de Euler-Cromer	17
1.3	Método de Verlet	18
1.3.1	Algoritmo <i>velocity-Verlet</i>	20
1.4	Método de Runge-Kutta	20
1.4.1	Método Runge-Kutta de 2 ^a ordem	21
1.4.2	Método de Runge-Kutta 4 ^a ordem	24
1.4.3	Controle de Erro nos Métodos RK	26
1.4.4	Região de Estabilidade do Problema-Modelo	27
1.5	Incrementos Adaptativos	28
1.5.1	Método RK45 - Cash-Karp	30
1.6	Métodos Multi-passos	31
1.6.1	Método de Adams-Bashforth	32
1.6.2	Método de Adams-Moulton	33
1.6.3	Previsão-Correção em Métodos Multi-Passos	34
1.6.4	Passo Variável em Métodos Muti-Passos	34
1.7	Erro Numérico Global	35
1.8	Atividades Sugeridas	36

2	Mapas	39
2.1	Mapa Logístico	39
2.2	Estabilidade para $\lambda < 0,25$	41
2.3	Estabilidade para $0,25 < \lambda < 0,75$	41
2.4	$\lambda > 0,75$ e o Limite Cíclico	43
2.5	$\lambda > 0,89$ e o Limite Caótico	44
2.6	Mapas de Teia e Mapas de Primeiro Retorno	45
2.7	Coeficiente de Lyapunov	47
2.8	Mapa de Hénon	48
2.9	Atividades Sugeridas	50
3	Números Aleatórios e Método de Monte Carlo	53
3.1	Sequências de Números Aleatórios	53
3.1.1	Características de Geradores de Números Aleatórios	54
3.1.2	Geradores Linear de Números Aleatórios Congruentes	55
3.1.3	Método de Schrage	56
3.2	Histogramas e a Densidade de Probabilidade	57
3.2.1	Histogramas	57
3.2.2	Densidade de Probabilidade	58
3.2.3	Relação entre histogramas e FDPs	59
3.2.4	Números Aleatórios Segundo uma Distribuição	61
3.3	Resolução de Integrais por Monte Carlo	63
3.3.1	Método 1: Amostragem Uniforme	64
3.3.2	Método 2: Amostragem Seletiva	64
3.4	Caminhante Aleatório	65
3.4.1	Modelo Discreto Unidimensional	66
3.4.2	Modelo Generalizado	67
3.4.3	Caminhante Aleatório e o Teorema do Limite Central	68
3.4.4	Distribuições Sem Momento Definido	68
A	Desigualdades	73
A.1	Desigualdades com valores absolutos	74

CAPÍTULO 1

Equações Diferenciais Ordinárias

Equação diferencial é a equação que apresenta a relação de uma função e suas derivadas. Equação diferencial ordinária é aquela em que a derivada é tomada em relação a uma única variável. A equação abaixo é um exemplo de uma equação diferencial ordinária (ODE):

$$\frac{dx^2}{dt^2} + q(t)\frac{dx}{dt} = r(x),$$

onde t é a variável independente e $x(t)$ é a variável dependente. Resolver uma ODE numericamente pode ser difícil dependendo da natureza das condições de contorno do problema. No caso mais simples, tais condições de contorno nada mais são do que condições algébricas para os valores iniciais de $x(t_0)$ e sua derivada $\frac{dx}{dt}(t_0)$ na equação acima. Este documento trata tão somente das condições de contorno ditas problemas de valores iniciais, na qual o valor de $x_0 \equiv x(t = 0)$ é conhecido para um dado valor da variável independente t_0 , e deseja-se encontrar o valor de $x(t_f)$ para um ponto final t_f .

De maneira geral, podemos reescrever uma equação diferencial ordinária de primeira ordem de forma a isolar a derivada, i.e:

$$\frac{dx}{dt} = f(t; x), \tag{1.1}$$

onde a função $f(t, x)$ pode ser facilmente computada.

1.0.1 Condições para Existência de Solução

Consideremos o caso de equações diferenciais de primeira ordem, que podem ser descritas pela seguinte equação:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x),$$

para a função x dependente da variável t . Para que encontremos a solução da equação acima, precisamos de uma condição extra, chamada de condição inicial:

$$x(t_0) = x_0,$$

de forma que apenas uma única solução dentre as infinitas possíveis seja selecionada. Mesmo que $f(t, x)$ seja contínua, não há nenhuma garantia de que $x(t)$ tenha solução única.

Definição 1.0.1. Diz-se que uma função $f(t, x)$ satisfaz a condição de Lipschitz para a variável x em um conjunto $D \subset \mathbb{R}^2$ se existe uma constante $L > 0$ tal que:

$$|f(t, x_1) - f(t, x_2)| \leq L |x_1 - x_2|, \quad (1.2)$$

para qualquer conjunto $(t, x_1), (t, x_2) \in D$.

A constante L é chamada de constante de Lipschitz para f .

Definição 1.0.2. Um conjunto D é dito convexo se para qualquer (t_1, x_1) e (t_2, x_2) pertencente a D e λ no intervalo $[0, 1]$, o ponto $((1 - \lambda)t_1 + \lambda t_2, (1 - \lambda)x_1 + \lambda x_2)$ também pertence a D .

Dito de outra forma, o conjunto é convexo se a reta que liga dois quaisquer pontos em D está completamente contida em D .

A partir destas definições iniciais, podemos obter informações sobre a existência de uma solução para a equação diferencial, e se esta é única. Para isto, lançamos mão dos dois teoremas seguintes.

Teorema 1.0.1. Suponha que $f(t, x)$ é definida em um conjunto convexo $D \subset \mathbb{R}^2$. Se existe uma constante $L > 0$ para a qual

$$\left| \frac{\partial f}{\partial x}(t, x) \right| \leq L, \quad \text{para todo } (t, x) \in D,$$

então f satisfaz a condição de Lipschitz em D para a variável x com a constante de Lipschitz L .

Teorema 1.0.2. Suponha o conjunto $D = \{(t, x) \mid a \leq t \leq b, -\infty < x < \infty\}$ e que $f(t, x)$ seja contínuo em D . Se f satisfaz a condição de Lipschitz em D para a variável x então o problema de condição inicial

$$x'(t) = f(t, x), \quad a \leq t \leq b, \quad x(a) = \alpha,$$

tem uma solução única $x(t)$ para $a \leq t \leq b$.

Teorema 1.0.3. Suponha $D = \{(t, x) \mid a \leq t \leq b, -\infty < x < \infty\}$. Se f é contínua e satisfaz a condição de Lipschitz para a variável x no conjunto D , então o problema de valor inicial

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), \quad a \leq t \leq b, \quad x(a) = \alpha,$$

possui uma solução única no intervalo $a \leq t \leq b$

1.0.2 Estabilidade da Solução

Daí segue o seguinte teorema:

Teorema 1.0.4. *O problema de valor inicial*

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), \quad a \leq t \leq b, \quad x(a) = \alpha,$$

é dito bem posto ("well-posed") se:

- existe uma solução única, $x(t)$ para o problema e
- existem uma constante $\epsilon_0 > 0$ tal que para qualquer ϵ , com $\epsilon_0 > \epsilon > 0$, para qualquer função $\delta(t)$ contínua com $|\delta(t)| < \epsilon$, para qualquer t no intervalo $[a, b]$, e com $|\delta_0| < \epsilon$, o problema de valor inicial

$$\frac{dz}{dt} = f(t, z) + \delta(t), \quad a \leq t \leq b, \quad z(a) = \alpha + \delta_0,$$

tem uma solução única $z(t)$ que satisfaz

$$|z(t) - x(t)| < \epsilon \quad \text{para todos } t \in [a, b]. \quad (1.3)$$

Finalmente:

Teorema 1.0.5. *Suponha $D = \{(t, x) \mid a \leq t \leq b, -\infty < x < \infty\}$. Se f é contínua e satisfaz a condição de Lipschitz para a variável x no conjunto D , então o problema de valor inicial*

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), \quad a \leq t \leq b, \quad x(a) = \alpha,$$

é bem posto.

O teorema acima mostra que pequenas mudanças nos dados iniciais conduzem a pequenas alterações nas respostas. Entretanto, pode ser que o problema seja bem posto, mas mal condicionado com respeito à computação numérica. Para melhor entender quando isto ocorre podemos calcular partir das seguintes equações:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) \rightarrow \int_{x(a)}^{x(t)} dx = x(t) - x(a) = \int_a^t f(t', x) dt',$$

que resulta em:

$$x(t) = \alpha + \int_a^t f(t', x) dt'.$$

De maneira análoga temos:

$$z(t) = \alpha + \delta_0 + \int_a^t [f(t', x) + \delta(t')] dt'.$$

A diferença entre as funções perturbada e não perturbada é dada por:

$$z(t) - x(t) = \delta_0 + \int_a^t [f(t', z) + \delta(t') - f(t', x)] dt'.$$

Podemos aplicar a operação de módulo em ambos os lados, resultando na inequação¹:

$$|z(t) - x(t)| \leq |\delta_0| + \left| \int_a^t [f(t', z) + \delta(t') - f(t', x)] dt' \right|,$$

que pode ser re-escrita como:

$$A(t) \leq |\delta_0| + L \int_{t_0}^t A(t') dt', \quad (1.4)$$

onde $A(t) \equiv |z(t) - x(t)|$. Na equação acima foi utilizada a definição (1.2).

Podemos multiplicar ambos os lados por $\exp(-Lt)$, resultando em:

$$A(t) e^{-Lt} \leq |\delta_0| e^{-Lt} + L e^{-Lt} \int_{t_0}^t A(t') dt'.$$

que pode ser re-escrita como:

$$\frac{d}{dt} \left[e^{-Lt} \int_{t_0}^t A(t') dt' \right] \leq |\delta_0| e^{-Lt},$$

que, quando integrada, resulta em:

$$e^{-Lt} \int_{t_0}^t A(t') dt' \leq \frac{|\delta_0|}{L} (e^{-Lt_0} - e^{-Lt}),$$

que resulta em:

$$L \int_{t_0}^t A(t') dt' \leq |\delta_0| (e^{L(t-t_0)} - 1), \quad (1.5)$$

Substituindo (1.4) em (1.5) temos:

$$A(t) \leq |\delta_0| e^{L(t-t_0)}, \quad t_0 \leq t \leq t_M.$$

Voltando ao nosso problema, podemos utilizar o teorema (1.3) para mostrar que:

$$\epsilon \leq |\delta_0| e^{L(t-t_0)}. \quad (1.6)$$

¹Vale lembrar que $|a + b| \leq |a| + |b|$.

Deste resultado temos que a equação diferencial somente será bem posta se

$$\frac{\partial f}{\partial x} \equiv L \leq 0,$$

já que somente neste caso $|z(t) - x(t)|$ permanecerá finito à medida que $t \rightarrow \infty$.

1.0.3 Solução Numérica

As tentativas de resolução das ODEs podem ser resumidas em re-escrever os diferenciais dx e dt em termos de passos finitos:

$$\begin{aligned} dx &\rightarrow \Delta x = x_{n+1} - x_n \\ dt &\rightarrow \Delta t = t_{n+1} - t_n, \end{aligned} \quad (1.7)$$

onde o índice i indica o n -ésimo passo discreto a partir das condições iniciais do problema. Matematicamente:

$$\frac{dx}{dt} = f(t; x) \sim \frac{\Delta x}{\Delta t} = f(t; x).$$

Podemos usar as definições (1.7) na equação acima, obtendo:

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t f(t; x).$$

Percebe-se desde já um pequeno inconveniente na equação acima: não fica claro em que valores de t e x a função $f(t; x)$ deve ser calculada (t_n ou t_{n+1} ? x_n ou x_{n+1} ?) Obviamente, no limite em que o passo Δt é pequeno, além de termos uma boa aproximação para as equações diferenciais, esta questão se torna menos e menos relevante. Entretanto, como veremos mais adiante, é necessário que se tome cuidado quanto ao limite inferior deste passo, que não deve ser muito pequeno a fim de se evitar erros numéricos.

No caso de equações ordinárias de ordem N , sendo $N=2$ ou superior, estas podem ser reescritas em N equações diferenciais de primeira ordem acopladas, com $i = 2, \dots, N$, tendo a forma:

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(t; x_1; \dots; x_N), \quad i = 1, \dots, N, \quad (1.8)$$

onde as funções f_i no lado direito são conhecidas.

1.1 Método de Euler

O método de Euler é o método mais simples de resolução de ODEs. Podemos deduzir a equação a ser utilizada através de uma expansão de Taylor para $x(t_n + \Delta t = t_{n+1})$:

$$x(t_n + \Delta t) = x(t)|_{t_n} + \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t_n} \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad (1.9)$$

onde $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ representa o termo quadrático em Δt e de ordem maiores. Caso esta última parcela seja removida da equação, ocorrerá um desvio do valor de $x(t_n + \Delta t)$ em relação ao valor numérico preciso: quanto menor for o valor de Δt , menor será o desvio ou erro numérico produzido por esta remoção.

1.1.1 Método de Euler Explícito

O método explícito é derivado diretamente da expressão (1.9):

$$x_{n+1} = x_n + f(t_n; x_n) h + \mathcal{O}(h^2), \quad (1.10)$$

onde:

$$\begin{aligned} h &\equiv \Delta t = t_{n+1} - t_n, \\ x_{n+1} &= x(t_{n+1}) = x(t_n + h) \text{ e} \\ x_n &= x(t_n). \end{aligned}$$

A última parcela no lado direito indica que o erro de truncamento local do método de Euler é proporcional à h^2 . Este método é chamado explícito, porque os valores de x_{n+1} , calculados no tempo t_{n+1} , são obtidos a partir de dados conhecidos no passo de tempo anterior t_n . Podemos notar que $f(t; x)$ é, na verdade a declividade da reta tangente à $x(t)$ no ponto avaliado. Assim, no método de Euler, a suposição implícita é de que a função $x(t)$ varia linearmente entre quaisquer dois pontos consecutivos avaliados. A equação acima pode ser re-escrita como:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x_{n+1} - x_n}{h}$$

No limite $h \rightarrow 0$, temos a definição da derivada.

1.1.2 Método de Euler Implícito

Um método alternativo consiste em começarmos com a seguinte expansão de Taylor:

$$x(t_n - \Delta t) = x(t)|_{t_{n-1}} - \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t_n} \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2),$$

que resulta, depois de negligenciarmos os termos quadráticos e superiores e rearranjarmos a equação, em:

$$x_n = x_{n-1} + f(t_n, x_n) h,$$

que pode ser re-escrita, sem perda de generalidade, em:

$$x_{n+1} = x_n + f(t_{n+1}, x_{n+1}) h. \quad (1.11)$$

Este é o método chamado implícito, porque os valores de x_{n+1} são obtidos a partir da resolução de uma equação implícita, i.e, de uma equação que pode depender de x_{n+1} , que é um valor desconhecido no tempo t_n . Esta equação pode ser calculada analiticamente ou, em casos mais complicados, numericamente através de um algoritmo de Newton-Rapson, por exemplo.

Exemplo

Imagine que temos a seguinte equação diferencial $x' = x$, e temos como condição inicial $x(t = 0) = 1$. Imagine que queremos calcular o valor de $x(t = 4)$ numericamente. Utilizando o procedimento descrito acima teremos como equação de evolução dos valores de x_{n+1} :

$$x_{n+1} = x_n + f(t_n; x_n) \times h = x_n + x_n \times h.$$

Vamos considerar neste exemplo, inicialmente, um passo h igual a 1. Assim, na primeira etapa, temos:

$$x_1 = x_0 + x_0 \times h = 1 + 1 \times 1 = 2.$$

Seguindo os próximos pontos:

$$x_2 = x_1 + f(t_1; x_1) h = y_1 + y_1 \times h = 2 + 2 \times 1 = 4.$$

$$x_3 = x_2 + f(t_2; x_2) h = y_2 + y_2 \times h = 4 + 4 \times 1 = 8.$$

$$x_4 = x_3 + f(t_3; x_3) h = y_3 + y_3 \times h = 8 + 8 \times 1 = 16.$$

A solução analítica é $x(t) = e^t$, logo, $x(t = 4) = e^4 \approx 54,598$. Podemos ver que a solução encontrada numericamente não é precisa. Este procedimento pode ser melhorado até certo ponto se escolhermos valores menores para h . Por exemplo, para $h = 0,5$:

$$x_1 = x_0 + f(t_0; x_0) h = 1 + 1 \times 0,5 = 1,5$$

$$x_2 = x_1 + f(t_1; x_1) h = 1,5 + 1,5 \times 0,5 = 2,25$$

$$x_3 = x_2 + f(t_2; x_2) h = 2,25 + 2,25 \times 0,5 = 3,375$$

$$x_4 = x_3 + f(t_3; x_3) h = 3,375 + 3,375 \times 0,5 = 5,0625$$

$$x_5 = x_4 + f(t_4; x_4) h = 5,0625 + 5,0625 \times 0,5 = 7,59375$$

$$x_6 = x_5 + f(t_5; x_5) h = 7,59375 + 7,59375 \times 0,5 = 11,390625$$

$$x_7 = x_6 + f(t_6; x_6) h = 11,390625 + 11,390625 \times 0,5 = 17,0859375$$

$$x_8 = x_7 + f(t_7; x_7) h = 17,0859375 + 17,0859375 \times 0,5 = 25,62890625.$$

Agora podemos aplicar o método implícito. No presente caso temos a seguinte equação:

$$x_{n+1} = x_n + f(t_{n+1}; x_{n+1}) h = x_n + x_{n+1} h = \frac{x_n}{1-h}$$

Escolhendo um valor de $\Delta x = 0,5$, temos a seguinte sequência:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{x_0}{1-h} = \frac{1}{1-0,5} = 2 \\ x_2 &= \frac{x_1}{1-h} = \frac{2}{1-0,5} = 4 \\ x_3 &= \frac{x_2}{1-h} = \frac{4}{1-0,5} = 8 \\ x_4 &= \frac{x_3}{1-h} = \frac{8}{1-0,5} = 16 \\ x_5 &= \frac{x_4}{1-h} = \frac{16}{1-0,5} = 32 \\ x_6 &= \frac{x_5}{1-h} = \frac{32}{1-0,5} = 64 \\ x_7 &= \frac{x_6}{1-h} = \frac{64}{1-0,5} = 128 \\ x_8 &= \frac{x_7}{1-h} = \frac{128}{1-0,5} = 256. \end{aligned}$$

1.1.3 Análise da Estabilidade do Método de Euler

Suponha que um problema de valor inicial bem estruturado é dado:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), \quad a \leq t \leq b, \quad x(a) = \alpha.$$

Podemos construir uma rede de pontos igualmente distribuídos no intervalo $[a, b]$:

$$t_i = a + i h, \quad \text{para cada } i = 0, 1, 2, \dots, N.$$

O passo temporal é h é dado por:

$$h = \frac{(b-a)}{N} = t_{i+1} - t_i.$$

Podemos usar series de Taylor para $x(t)$:

$$x(t_{i+1}) = x(t_i) + (t_{i+1} - t_i)x'(t_i) + \frac{(t_{i+1} - t_i)^2}{2}x''(\xi_i),$$

para $\xi_i \in (t_i, t_{i+1})$. Já que $h \equiv t_{i+1} - t_i$ e $x'(t_i) = f(t_i, x(t_i))$:

$$x(t_{i+1}) = x(t_i) + h f(t_i, x(t_i)) + \frac{h^2}{2}x''(\xi_i).$$

Caso se despreze a última parcela da equação acima, teremos $w_i \approx x(t_i)$:

$$\begin{cases} w_0 &= \alpha \\ w_{i+1} &= w_i + hf(t_i, w_i), \quad i = 0, 1, \dots, N-1. \end{cases} \quad (1.12)$$

O fato deste ser um problema bem posto implica:

$$f(t_i, w_i) = x'(t_i) = f(t_i, x(t_i)).$$

Erro de Truncamento

Podemos calcular facilmente o erro de truncamento (τ_n) para o método de Euler, sendo este a diferença entre valor analítico da função e o valor obtido utilizando-se este método $\tau_n = x(t_{n+1}) - w_{n+1}$:

$$\tau_n = \left\{ x(t_n) + hf(t_n, x(t_n)) + \frac{h^2}{2}x''(\xi_n) \right\} - [w_n + hf(t_n, w_n)],$$

que resulta em:

$$|x(t_{n+1}) - w_{n+1}| \leq |x(t_n) - w_n| + h|f(t_n, x(t_n)) - f(t_n, w_n)| + \frac{h^2}{2}|x''(\xi_n)|.$$

Se f satisfizer a condição de Lipschitz (eq. 1.2), e se utilizarmos a equação (1.6), podemos escrever a equação acima como:

$$|x(t_{n+1}) - w_{n+1}| \leq (1 + hL)|x(t_n) - w_n| + \frac{h^2 M}{2}, \quad (1.13)$$

onde M é uma constante tal que $|x''(t)| \leq M$. Pode-se mostrar que a equação acima pode ser re-escrita como:

$$|x(t_{n+1}) - w_{n+1}| \leq \frac{hM}{2L} \left(e^{(t_{i+1}-t_0)L} - 1 \right),$$

para cada $i = 0, 1, \dots, N-1$.

Erro de Arredondamento e Truncamento

Da equação (1.13) infere-se que quanto menor o valor de h , melhor será a aproximação do método. Entretanto, negligencia-se neste caso o erro de arredondamento que inevitavelmente acaba influenciando qualquer resultado obtido a partir do uso de computadores: quanto menor o valor de h , mais cálculos são necessários e maior será, portanto, os erros de arredondamentos que ocorrem em cada um dos passos.

Suponhamos que uma equação diferencial de primeira ordem possa ser resolvida de duas formas: sem erros de arredondamento (conforme eqs. 1.12) e com erro de arredondamento:

$$\begin{cases} u_0 &= \alpha + \delta_0 \\ u_{i+1} &= u_i + hf(t_i, u_i) + \delta_{i+1}, \quad i = 0, 1, \dots, N-1, \end{cases} \quad (1.14)$$

onde δ_i denota o erro de arredondamento associado com u_i . Podemos fazer uma análise semelhante com aquela feita com o erro de truncamento e encontrar uma expressão para descrever o erro de arredondamento realizado pela aproximação de dígitos finitos no cálculo de $x(t)$. Neste caso:

$$|x(t_{n+1}) - u_{n+1}| \leq \frac{1}{L} \left(\frac{hM}{2} - \frac{\delta}{h} \right) \left[e^{(t_{i+1}-t_0)L} - 1 \right] + |\delta_0| e^{L(t_i-t_0)},$$

para cada $i = 0, 1, \dots, N-1$.

Pode-se ver rapidamente que:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{hM}{2} + \frac{\delta}{h} \rightarrow \infty$$

Existe, portanto, um valor ótimo para h , que pode ser encontrado facilmente:

$$\frac{d}{dh} \left(\frac{hM}{2} + \frac{\delta}{h} \right) = \frac{M}{2} - \frac{\delta}{h^2} = 0,$$

e, portanto:

$$h_{\text{melhor}} = \frac{2\delta}{M}.$$

Região de Estabilidade do Problema-Modelo

Uma forma alternativa de se entender a região de estabilidade de um método numérico de resolução de equações diferenciais ordinárias consiste em se resolver o problema modelo de equação diferencial com valor inicial:

$$\begin{cases} x(t=0) &= x_0 \\ x' &= \lambda x, \end{cases} \quad (1.15)$$

onde λ é uma constante $\in \mathbb{C}$. A solução analítica do modelo é:

$$x(t) = x_0 e^{\lambda t}.$$

Note que a solução assintótica de $x(t)$ só não diverge se $|\lambda| \leq 1$.

Podemos agora resolver o problema-modelo no caso do método de Euler explícito. Neste caso:

$$w_1 = w_0 + h \phi(t_0, w_0, h) = w_0 + h(\lambda w_0) = (1 + h\lambda) w_0,$$

cuja solução depois de n passos é:

$$w_n = (1 + h\lambda)^n w_0.$$

Obviamente este valor não divergirá se:

$$|1 + h\lambda| = |1 + h\Re(\lambda) + ih\Im(\lambda)| = \sqrt{[1 + h\Re(\lambda)]^2 + [h\Im(\lambda)]^2} \leq 1.$$

Note pela figura (1.1) que somente parte do plano imaginário é estável para o método de Euler: somente a parte achurada, com raio λh . Para qualquer região fora desta área, a solução numérica diverge enquanto a solução analítica decai. Isto é um forte indicativo de que o método é condicionalmente estável (estável somente para alguns valores de h). Se λ for real, a região de estabilidade é tal que:

$$0 \leq h \leq \frac{2}{|\lambda|}.$$

Se

$$|1 + \lambda h| > 1,$$

então $(1 + \lambda h)$ é negativo, com magnitude maior do que 1, e como:

$$w_n = (1 + h\lambda)^n w_0,$$

as sucessivas soluções serão oscilatórias com mudança de sinal a cada passo.

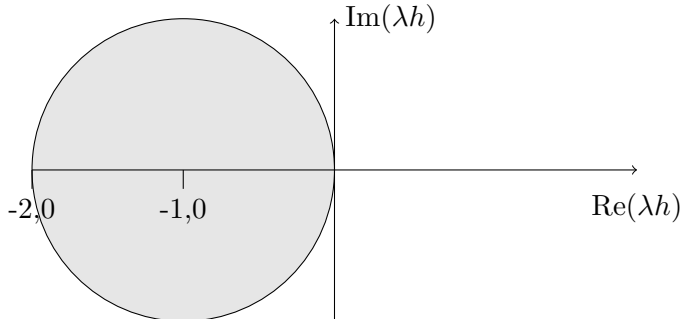


Figura 1.1: Região de estabilidade para o método de Euler explícito.

1.2 Método de Euler-Cromer

O método de Euler-Cromer é uma modificação do método de Euler usado para a solução das equações de movimento que surgem em mecânica clássica ao se resolver aplicar a segunda lei de Newton:

$$F = m a = m \frac{d^2 x}{dt^2}.$$

O método de iteração é modificado em relação ao método de Euler Explícito. As equações diferenciais podem ser expressas como:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= v \\ \frac{dv}{dt} &= a(t; x; v)\end{aligned}$$

O método pode ser descrito como:

$$\begin{aligned}v_{n+1} &= v_n + a(t_n; x_n; v_n) h \\ x_{n+1} &= x_n + v_{n+1} h,\end{aligned}$$

onde h é o passo temporal e $t_n = t_0 + n h$ é o tempo depois de n passos. Note que a grande diferença entre o método de Euler-Cromer e o método de Euler tradicional tem a ver com o fato de que no primeiro a velocidade atualizada no tempo v_{n+1} é utilizada para o cálculo da posição x_{n+1} , ao contrário da velocidade v_n , que seria utilizada no método de Euler tradicional. Esta mudança é sutil, mas permite que a energia total do sistema no cálculo permaneça praticamente constante, ao contrário do que ocorre no método de Euler, quando a energia geralmente aumenta gradativamente à medida que os passos temporais vão ocorrendo.

1.3 Método de Verlet

O método de Verlet é bastante utilizado para a integração da equação de movimento de partículas interagentes, no qual são conhecidas todas as forças de interação internas. Uma derivação do método clássico de Verlet consiste em utilizar as equações de movimento:

$$\begin{aligned}v_n &= \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t_n} \\ a_n &= \left. \frac{dv}{dt} \right|_{t_n}.\end{aligned}$$

Começamos expandindo a posição posterior:

$$x_{n+1} = x_n + \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t_n} h + \frac{1}{2} \left. \frac{dx^2}{dt^2} \right|_{t_n} h^2 + \frac{1}{3!} \left. \frac{dx^3}{dt^3} \right|_{t_n} h^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (1.16)$$

e anterior ao tempo t_n de uma partícula:

$$x_{n-1} = x_n - \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t_n} h + \frac{1}{2} \left. \frac{dx^2}{dt^2} \right|_{t_n} h^2 - \frac{1}{3!} \left. \frac{dx^3}{dt^3} \right|_{t_n} h^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (1.17)$$

Podemos agora somar as equações (1.16) e (1.17), obtendo:

$$x_{n+1} + x_{n-1} = 2x_n + \left. \frac{dx^2}{dt^2} \right|_{t_n} h^2 + \mathcal{O}(\Delta h^4) \quad (1.18)$$

e subtraindo as mesmas equações temos:

$$x_{n+1} - x_{n-1} = 2 \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t_n} h + \mathcal{O}(h^3). \quad (1.19)$$

Assim, esquecendo os termos de mais alta ordem, podemos obter as seguintes expressões, tanto a partir de (1.18):

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + a(t_n; v_n) h^2 \quad (1.20)$$

e a partir de (1.19):

$$v_n = \frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{2h}. \quad (1.21)$$

Para se utilizar a equação (1.20), é necessário que se conheça inicialmente a posição da partícula em dois intervalos de tempo sucessivos. Este, geralmente, não é o caso, já que o mais usual é termos como condição inicial somente a posição da partícula (e a velocidade) no instante inicial. Entretanto, a posição da partícula no tempo t_1 pode ser estimada a partir da expansão em séries de Taylor:

$$x_1 = x_0 + v_0 \Delta t + \frac{1}{2} a_0 \Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

Em geral este erro inicial não é considerado um problema grande pois depois de uma sucessão de passos de tempo ele torna-se pequeno frente ao erro total.

Embora a equação (1.20) seja suficiente para se calcular as trajetórias das partículas, em muitas situações é necessário que se conheça também as velocidades das partículas para que possamos, por exemplo, calcular a energia cinética total a fim de se verificar se há conservação de energia no sistema. Entretanto, a equação (1.21) para a velocidade da partícula, que encontra-se no trabalho original de Verlet, possui dois problemas principais: ela precisa ser inicializada por alguma outra equação e, ademais, ela produz valores incorretos de velocidade que conduzem, quando utilizadas para calcular a energia cinética das partículas, ao descumprimento do teorema da conservação de energia total.

Um problema grande que há com o cálculo da velocidade através da equação (1.21) está no fato de que no mesmo instante de tempo t_n , a posição e a velocidade calculadas não referem-se ao mesmo instante de tempo, ou seja, calcula-se a posição x_{n+1} e a velocidade v_n . Uma maneira alternativa de se calcular a velocidade no instante de tempo seguinte é utilizarmos a expressão:

$$v_{n+1} = \frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

1.3.1 Algoritmo *velocity-Verlet*

Conforme mencionado anteriormente, o algoritmo de Verlet é bastante utilizado quando se quer calcular as trajetórias de um sistema de partículas, sem se preocupar com a velocidade das mesmas. Entretanto, um algoritmo derivado deste, chamado de *velocity-Verlet* é mais utilizado, pois calcula no mesmo instante a velocidade e a posição das partículas. Entretanto, cabe aqui uma ressalva: este método é útil somente quando a força que age sobre as partículas não depende explicitamente da velocidade. Em resumo, este é um método híbrido, que utiliza um meio-passo para a velocidade em $h/2$, antes do cálculo da velocidade definitiva em h . Os passos de implementação são os seguintes cálculos:

1. velocidade no meio do intervalo: $v_{n+\frac{1}{2}} = v_n + \frac{1}{2} a_n h$;
2. posição no fim do intervalo: $x_{n+1} = x_i + v_{n+\frac{1}{2}} h$;
3. aceleração no fim do intervalo: $a_{n+1} = a(x_{n+1})$;
4. velocidade final: $v_{n+1} = v_{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} a_{n+1} h$.

Novamente, note que o método assume que a aceleração não depende explicitamente da velocidade. Alternativamente, um dos passos intermediários pode ser eliminado, resultando em:

1. posição no fim do intervalo: $x_{n+1} = x_i + v_i h + \frac{1}{2} a_n h^2$;
2. aceleração no fim do intervalo: $a_{n+1} = a(x_{n+1})$;
3. velocidade final: $v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2} (a_n + a_{n+1}) h$.

Tanto este método quanto o método de Verlet tradicional tem erro local $\mathcal{O}(h^4)$ na posição e $\mathcal{O}(h^2)$ na velocidade. Em sistemas conservativos, onde a energia total permanece constante, a solução numérica pelo método de Verlet oscila próximo ao valor real da energia.

1.4 Método de Runge-Kutta

Um outro método para a resolução de EDO foi descrito pelo matemáticos alemães Runge e Kutta. Este método consiste em utilizarmos mais termos da expansão de x_{n+1} em séries de Taylor do que os dois primeiros termos da série. Como exemplo, vamos considerar o método descrito como Runge-Kutta de segunda ordem.

1.4.1 Método Runge-Kutta de 2ª ordem

No caso deste método, utiliza-se somente os três primeiros termos da expansão, assim:

$$x_{n+1} = x_n + \left. \frac{dy}{dt} \right|_{(t_n, x_n)} h + \frac{1}{2!} \left. \frac{d^2x}{dt^2} \right|_{(t_n, x_n)} h^2 + \mathcal{O}(h^3).$$

Utilizando as mesmas abreviações anteriores, podemos reescrever a equação acima como:

$$x_{n+1} = x_n + f(t_n, x_n)h + \frac{1}{2}f'(t_n, x_n)h^2, \quad (1.22)$$

onde $dx/dt = f(t; x)$ e $h \equiv t_{n+1} - t_n$. Podemos ver desde já que o método RK2 possui erro local $\mathcal{O}(h^3)$. Em princípio poderíamos calcular analiticamente o valor de $f'(t_n, x_n)$ mas isto tornaria o método menos genérico. O que Runge e Kutta fizeram foi redefinir a equação acima como:

$$x_{n+1} = x_n + (a_1 k_1 + a_2 k_2) h, \quad (1.23)$$

onde

$$k_1 \equiv f(t_n; x_n),$$

e

$$k_2 \equiv f(t_n + p_1 h; x_n + q_{11} k_1 h).$$

Se retornarmos a equação (1.23) na equação (1.22), teremos o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} a_1 + a_2 &= 1 \\ a_2 p_1 &= 1 \\ a_2 q_{11} &= 1 \end{aligned}$$

Como temos 3 equações para resolvermos 4 variáveis, podemos ter diferentes respostas dependendo da escolha arbitrária que podemos fazer sobre uma variável em particular. Classicamente, temos 3 métodos utilizados corriqueiramente para o método de Runge-Kutta 2ª ordem: métodos de Heun, do ponto central e Ralston.

Método de Heun

Neste caso a escolha arbitrária é feita definindo-se $a_2 = 1/2$. Temos como consequência:

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{1}{2} \\ a_1 + a_2 &= 1 \rightarrow a_1 = \frac{1}{2} \\ a_2 p_1 &= \frac{1}{2} \rightarrow p_1 = 1 \\ a_2 q_{11} &= \frac{1}{2} \rightarrow q_{11} = 1. \end{aligned}$$

Logo:

$$x_{n+1} = x_n + \left(\frac{1}{2} k_1 + \frac{1}{2} k_2 \right) h \quad (1.24)$$

$$k_1 = f(t_n; x_n) \quad (1.25)$$

$$k_2 = f(t_n + h; x_n + k_1 h). \quad (1.26)$$

Vemos que neste caso o método de Runge-Kutta seria equivalente ao método de Euler, onde o valor da tangente da função x escolhido entre os pontos t_n e t_{n+1} é a média do valor da tangente nos pontos t_n e t_{n+1} .

Método do Ponto Central

Neste caso a escolha arbitrária é feita definindo-se $a_2 = 1$. Temos como consequência:

$$\begin{aligned} a_2 &= 1 \\ a_1 + a_2 &= 1 \rightarrow a_1 = 0 \\ a_2 p_1 &= \frac{1}{2} \rightarrow p_1 = \frac{1}{2} \\ a_2 q_{11} &= \frac{1}{2} \rightarrow q_{11} = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Logo:

$$x_{n+1} = x_n + k_2 h \quad (1.27)$$

$$k_1 = f(t_n; x_n) \quad (1.28)$$

$$k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}; x_n + \frac{k_1 h}{2}\right). \quad (1.29)$$

Vemos que neste caso o método de Runge-Kutta seria equivalente ao método de Euler, onde o valor da tangente da função x escolhido entre os pontos t_n e t_{n+1} é uma estimativa valor da tangente no ponto equidistante entre t_n e t_{n+1} .

Método de Ralston

Neste caso a escolha arbitrária é feita definindo-se $a_2 = 2/3$. Temos como consequência:

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{2}{3} \\ a_1 + a_2 &= 1 \rightarrow a_1 = \frac{1}{3} \\ a_2 p_1 &= \frac{1}{2} \rightarrow p_1 = \frac{3}{4} \\ a_2 q_{11} &= \frac{1}{2} \rightarrow q_{11} = \frac{3}{4}. \end{aligned}$$

Logo:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \left(\frac{1}{3} k_1 + \frac{2}{3} k_2\right) h \\ k_1 &= f(t_n; x_n) \\ k_2 &= f\left(t_n + \frac{3}{4} h; x_n + \frac{3}{4} k_1 h\right). \end{aligned}$$

Método RK2 - ponto médio - em Mecânica

Na prática, quando resolvemos a equação do movimento para um corpo, o método RK2 consiste em se calcular a posição e velocidade em um ponto intermediário, antes de se calcular o passo h total. No ponto intermediário temos:

$$\begin{aligned} t_{n+\frac{1}{2}} &= t_n + \frac{h}{2} \\ x_{n+\frac{1}{2}} &= x_n + v_n \frac{h}{2} \\ v_{n+\frac{1}{2}} &= v_n + a_n \frac{h}{2} \\ a_{n+\frac{1}{2}} &= a(t_{n+\frac{1}{2}}; x_{n+\frac{1}{2}}; v_{n+\frac{1}{2}}), \end{aligned}$$

e no ponto final temos:

$$\begin{aligned}t_{n+1} &= t_n + h \\x_{n+1} &= x_n + v_{\frac{1}{2}} h \\v_{n+1} &= v_n + a_{n+\frac{1}{2}} h \\a_{n+1} &= a(t_{n+1}; x_{n+1}; v_{n+1}).\end{aligned}$$

1.4.2 Método de Runge-Kutta 4ª ordem

Este método, chamado de RK4, utiliza as 5 primeiras parcelas da série de Taylor da expansão de $x(t+h)$. Assim, o método RK4 possui erro local $O(h^5)$. Daí, como no caso de Runge-Kutta 2ª ordem, podemos definir estas parcelas como sendo iguais a uma expressão que não contém as derivadas de alta ordem: diferentes métodos terão diferentes equações. Vamos descrever abaixo alguns destes métodos.

Método de Runge

Runge propôs a seguinte expressão:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] h, \quad (1.30)$$

onde

$$\begin{aligned}k_1 &= f(t_n; x_n) \\k_2 &= f\left(t_n + \frac{1}{2}h; x_n + \frac{1}{2}k_1 h\right) \\k_3 &= f\left(t_n + \frac{1}{2}h; x_n + \frac{1}{2}k_2 h\right) \\k_4 &= f(t_n + h; x_n + k_3 h)\end{aligned}$$

Método de Kutta

Kutta sugeriu uma expressão alternativa:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{8} [k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4] h, \quad (1.31)$$

onde

$$\begin{aligned}k_1 &= f(t_n; x_n) \\k_2 &= f\left(t_n + \frac{1}{3}h; y_n + \frac{1}{3}k_1 h\right) \\k_3 &= f\left(t_n + \frac{2}{3}h; y_n - \frac{1}{3}k_1 h + k_2 h\right) \\k_4 &= f(t_n + h; y_n + k_1 h - k_2 h + k_3 h)\end{aligned}$$

Método de RK4 - Runge - em Mecânica

Na prática, quando resolvemos a equação do movimento para um corpo, o método RK4 consiste em se calcular a posição e velocidade em 3 pontos intermediários, além do ponto descrito no método RK2, antes de se calcular o passo h total. Como no caso do RK2, temos inicialmente:

$$\begin{aligned}{}_1x_n &= x_n \\{}_1v_n &= v_n \\{}_1a_n &= a(t_n; {}_1x_n; {}_1v_n).\end{aligned}$$

No primeiro passo intermediário temos:

$$\begin{aligned}{}_2t_n &= t_{n+\frac{1}{2}} = t_n + \frac{h}{2} \\{}_2x_n &= x_{n+\frac{1}{2}} = {}_1x_n + {}_1v_n \frac{h}{2} = x_n + v_n \frac{h}{2} \\{}_2v_n &= v_{n+\frac{1}{2}} = {}_1v_n + {}_1a_n \frac{h}{2} = v_n + a_n \frac{h}{2} \\{}_2a_n &= a_{n+\frac{1}{2}} = a(t_n; {}_1x_n; {}_1v_n) = a\left(t_{n+\frac{1}{2}}; x_{n+\frac{1}{2}}; v_{n+\frac{1}{2}}\right).\end{aligned}$$

No segundo ponto intermediário temos:

$$\begin{aligned}{}_3t_n &= {}_2t_n = t_{n+\frac{1}{2}} \\{}_3x_n &= x_n + {}_2v_n \frac{h}{2} = x_n + v_{n+\frac{1}{2}} \frac{h}{2} \\{}_3v_n &= v_n + {}_2a_n \frac{h}{2} = v_n + a_{n+\frac{1}{2}} \frac{h}{2} \\{}_3a_n &= a({}_2t_n; {}_2x_n; {}_2v_n) = a\left(t_{n+\frac{1}{2}}; x_{n+\frac{1}{2}}; v_{n+\frac{1}{2}}\right).\end{aligned}$$

No último ponto temos:

$$\begin{aligned}{}_4t_n &= t_n + h \\{}_4x_n &= x_n + {}_3v_n h \\{}_4v_n &= v_n + {}_3a_n h \\{}_4a_n &= a(t_{n+1}; {}_4x_n; {}_4v_n).\end{aligned}$$

Finalmente temos, no passo completo:

$$\begin{aligned} t_{n+1} &= t_n + h \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{6} [1v_n + 2_2v_n + 2_3v_n + 4v_n] h \\ v_{n+1} &= v_n + \frac{1}{6} [1a_n + 2_2a_n + 2_3a_n + 4a_n] h. \end{aligned}$$

1.4.3 Controle de Erro nos Métodos RK

Suponhamos que um problema de valor inicial seja resolvido através de um método de Runge-Kutta, através de:

$$\begin{cases} w_0 &= \alpha \\ w_{i+1} &= w_i + h\phi(t_i, w_i, h), \quad i = 0, 1, \dots, N-1, \end{cases} \quad (1.32)$$

com erro de truncamento $\tau_{i+1} = \mathcal{O}(h^m)$. Este mesmo problema pode ser resolvido utilizando-se um outro método de Runge-Kutta com erro de truncamento $\tilde{t}\tilde{a}u_{i+1} = \mathcal{O}(h^p)$, com $p > m$, através de:

$$\begin{cases} \tilde{w}_0 &= \alpha \\ \tilde{w}_{i+1} &= \tilde{w}_i + h\tilde{\phi}(t_i, \tilde{w}_i, h), \quad i = 0, 1, \dots, N-1, \end{cases} \quad (1.33)$$

Assumimos que o valor atual da função é tal que $w_i \sim x(t_i) \sim \tilde{w}_i$. Assim, o erro de truncamento para o primeiro sistema pode ser calculado como:

$$\begin{aligned} \tau_i &= \frac{x(t_{i+1}) - x(t_i)}{h} - \phi(t_i, y(t_i), h) \\ &= \frac{x(t_{i+1}) - w_i}{h} - \phi(t_i, w_i, h) \\ &= \frac{x(t_{i+1}) - [w_i + h\phi(t_i, w_i, h)]}{h} \\ &= \frac{1}{h}[x(t_{i+1}) - w_{i+1}]. \end{aligned}$$

E, de maneira similar:

$$\tilde{\tau}_i = \frac{1}{h}[x(t_{i+1}) - \tilde{w}_{i+1}].$$

Consequentemente:

$$\begin{aligned} \tau_{i+1} &= \frac{1}{h}[x(t_{i+1}) - w_{i+1}] \\ &= \frac{1}{h}[x(t_{i+1}) - \tilde{w}_{i+1} + \tilde{w}_{i+1} - w_{i+1}] \\ &= \tilde{\tau}_{i+1} + \frac{1}{h}[\tilde{w}_{i+1} - w_{i+1}]. \end{aligned}$$

Como τ_{i+1} é $\mathcal{O}(h^m)$ e $\tilde{\tau}_{i+1}$ é $\mathcal{O}(h^p)$ com $p > m$, o termo significativo de τ_{i+1} deve vir da parcela $[\tilde{w}_{i+1} - w_{i+1}]/h$. Assim, temos, aproximadamente:

$$\tau_{i+1} \sim \frac{1}{h}[\tilde{w}_{i+1} - w_{i+1}].$$

Para o ajuste do valor do passo h , podemos assumir que existe um valor K , independente de h , para o qual é válida a seguinte aproximação:

$$\tau_{i+1} \sim K h^m.$$

Podemos então calcular o novo passo qh através de:

$$\tau_{i+1} \sim K(qh)^m = q^m K h^m \sim q^m \frac{1}{h}[\tilde{w}_{i+1} - w_{i+1}].$$

Se escolhermos arbitrariamente um valor máximo para o erro de truncamento ε , teremos:

$$\left| \frac{q^m}{h}[\tilde{w}_{i+1} - w_{i+1}] \right| \leq \varepsilon,$$

e, portanto:

$$q \leq \left(\frac{\varepsilon h}{|\tilde{w}_{i+1} - w_{i+1}|} \right)^{1/m}.$$

1.4.4 Região de Estabilidade do Problema-Modelo

Podemos aplicar o método de RK para o problema modelo. Vamos analisar primeiramente o que ocorre para o caso de segunda-ordem (método do ponto-médio). O valor de w_1 é dado por:

$$\begin{aligned} k_1 &= \lambda w_0 \\ k_2 &= \lambda \left[w_0 + \frac{h}{2}(\lambda w_0) \right] = w_0 \left(\lambda + \frac{\lambda^2 h}{2} \right) \\ w_1 &= w_0 + h k_2 = w_0 \left[1 + \lambda h + \frac{\lambda^2 h^2}{2} \right] \end{aligned}$$

De maneira iterativa, pode-se mostrar que depois de n passos:

$$w_n = w_0 \left[1 + \lambda h + \frac{\lambda^2 h^2}{2} \right]^n.$$

Novamente, este resultado não divergirá se:

$$\left| 1 + \lambda h + \frac{\lambda^2 h^2}{2} \right| \leq 1.$$

Já para o método de RK4, a resolução do problema-modelo é:

$$\begin{aligned} k_1 &= \lambda w_0 \\ k_2 &= \lambda \left[w_0 + \frac{h}{2}(\lambda w_0) \right] = w_0 \left(\lambda + \frac{\lambda^2 h}{2} \right) \\ k_3 &= \lambda \left[w_0 + \frac{h}{2} \left(w_0 \left(\lambda + \frac{\lambda^2 h}{2} \right) \right) \right] = w_0 \left[\lambda + \frac{\lambda h}{2} + \frac{\lambda^2 h^2}{4} \right] \\ k_4 &= \lambda \left[w_0 + h w_0 \left(\lambda + \frac{\lambda h}{2} + \frac{\lambda^2 h^2}{4} \right) \right]. \end{aligned}$$

Temos como resultado:

$$\begin{aligned} w_1 &= w_0 + \frac{h}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] \\ &= w_0 \left(1 + \lambda h + \frac{\lambda^2 h^2}{2} + \frac{\lambda^3 h^3}{6} + \frac{\lambda^4 h^4}{24} \right). \end{aligned}$$

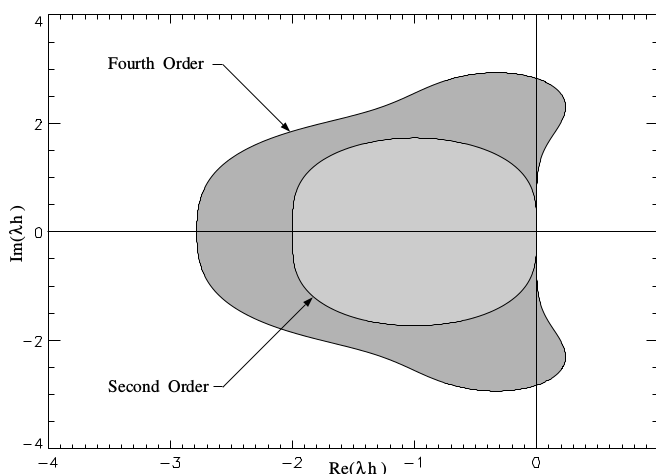


Figura 1.2: Região de estabilidade para os métodos RK2 e RK4.

1.5 Incrementos Adaptativos

Às vezes é interessante, durante a resolução de uma EDO, que o incremento de tempo h possa ser variável, uma vez que existem regiões específicas que são mais sensíveis ao valor de h e outras onde o valor desta variável poderia ser incrementado sem perda expressiva de precisão.

Podemos começar a dedução de um método para a estimativa de h_{novo} através da razão entre o erro obtido no passo $i+1$, realizado com passo h_{novo} e o erro obtido no passo i , realizado com h . Esta razão pode ser expressa como:

$$\frac{\varepsilon_{i+1}}{\varepsilon_i} = \frac{k_{i+1} h_{i+1}^m}{k_i h_i^m},$$

onde k_{i+1} e k_i são duas constantes de proporcionalidade que podem, em princípio, ser calculadas. Entretanto, podemos, em um primeiro momento, definir a razão destas duas constantes como sendo a unidade, de forma que teremos:

$$\frac{\varepsilon_{i+1}}{\varepsilon_i} \sim \left(\frac{h_{i+1}}{h_i} \right)^m,$$

e, rearranjando:

$$h_{i+1} = h_i \left(\frac{\varepsilon_{i+1}}{\varepsilon_i} \right)^{1/m}.$$

Podemos admitir um erro máximo no cálculo da nova posição $i+1$ igual a ε , de forma que temos como resultado:

$$h_{novo} = h_{i+1} = h \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_c} \right)^{1/m}. \quad (1.34)$$

Para definirmos um passo variável, necessitamos de dois valores extras: o erro máximo admissível por passo ε e o erro corrente ε_c . O máximo erro admissível é um dos dados que devem ser fornecidos pelo usuário sendo, portanto, um dado inicial do problema. O erro corrente não é conhecido, *a priori*, uma vez que se fosse conhecido isto implicaria que o valor exato é conhecido e não haveria necessidade de se calcular o valor numérico. Existem inúmeras formas de se estimar o erro corrente ε_c ; algumas delas são listadas abaixo.

A forma mais simples de estimativa consiste em se utilizar um único método e, a cada n -ésimo passo de integração, se resolver o problema utilizando os seguintes passos temporais: h_n e $h_n/2$ (este último deve ser aplicado duas vezes consecutivas, para se chegar no mesmo tempo t_{n+1}). A diferença no valor de x_{n+1} encontradas por cada um dos passos temporais será uma estimativa do erro corrente.

Entretanto, uma forma variada de se estimar este erro é utilizarmos dois métodos diferentes com o mesmo passo h , digamos um método 4^a ordem e outro 5^a ordem, e calculamos o valor da função no ponto x_{n+1} pelos dois métodos. De forma análoga ao procedimento anterior, a diferença entre os valores da função ao final do passo (ou seja, em x_{n+1} no tempo t_{n+1}) é uma estimativa para o erro corrente do método com erro na menor potência (no presente exemplo, o método de 4^a ordem) na próxima integração.

Podemos utilizar diversos mecanismos para evitar que o valor de h mude de forma abrupta de um passo para o próximo. O mais simples deles é supor

um valor máximo e um valor mínimo para h ; após o cálculo de h_{novo} verifica-se se este está fora dos limites estabelecidos e caso afirmativo, utiliza-se os valores limites ao invés do valor calculado.

Um método alternativo consiste em se definir duas variáveis auxiliares S_1 e S_2 . Assim, para valores de $S_1 < 1$ (por exemplo, $S_1 = 0.9$), redefinimos h_{novo} como:

$$h_{novo} = hS_1 \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_c} \right)^{1/m}. \quad (1.35)$$

O valor máximo de h_{novo} é S_2h , onde $S_2 > 1$ (por exemplo, $S_2 = 2$).

1.5.1 Método RK45 - Cash-Karp

Um fato interessante sobre os métodos de Runge-Kutta é que a partir de ordens M maiores do que 4, o valor da função ao final do intervalo tem que ser obtido através de um número maior de pontos do que M ; este sendo outro motivo pelo qual o método de quarta ordem é o mais utilizado. Entretanto Fehlberg descobriu um método de quinta ordem, que necessita do cálculo de 6 posições da função dentro do intervalo h , mas que uma combinação diferente destes mesmos 6 pontos resulta em um método de quarta ordem. Com isto, abriu-se a possibilidade de realizarmos a avaliação da função depois do intervalo h através de dois métodos diferentes, mas utilizando os mesmos pontos para ambos. A forma geral do método de Runge-Kutta quinta ordem é:

$$k_1 = h f(x_n; t_n) \quad (1.36)$$

$$k_2 = h f(x_n + b_{21} k_1; t_n + a_2 h) \quad (1.37)$$

$$k_3 = h f(x_n + b_{31} k_1 + b_{32} k_2; t_n + a_3 h) \quad (1.38)$$

$$\dots \quad (1.39)$$

$$k_6 = h f(x_n + b_{61} k_1 + b_{62} k_2 + \dots + b_{65} k_5; t_n + a_6 h) \quad (1.40)$$

$$x_{n+1} = x_n + c_1 k_1 + c_2 k_2 + c_3 k_3 + c_4 k_4 + c_5 k_5 + c_6 k_6, \quad (1.41)$$

e a equação de quarta-ordem associada é:

$$x_{n+1}^* = x_n + c_1^* k_1 + c_2^* k_2 + c_3^* k_3 + c_4^* k_4 + c_5^* k_5 + c_6^* k_6.$$

Assim a estimativa do erro corrente é:

$$\varepsilon_c = |x_{n+1} - x_{n+1}^*| = \sum_{i=1}^6 (c_i - c_i^*) k_i.$$

Os valores utilizados para as constantes acima foram identificados por Cash e Karp, e são identificados na tabela (1.1).

i	a_i	b_{ij}					c_i	c_i^*
1						$\frac{37}{378}$	$\frac{2825}{27648}$	
2	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$				0	0	
3	$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$			$\frac{250}{621}$	$\frac{18575}{48384}$	
4	$\frac{3}{5}$	$\frac{3}{10}$	$-\frac{9}{10}$	$\frac{6}{5}$		$\frac{125}{594}$	$\frac{13525}{53296}$	
5	1	$-\frac{11}{54}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{70}{27}$	$\frac{35}{27}$	0	$\frac{277}{14336}$	
6	$\frac{7}{8}$	$\frac{1631}{55296}$	$\frac{175}{512}$	$\frac{575}{13824}$	$\frac{44275}{110592}$	$\frac{253}{4096}$	$\frac{1}{4}$	
$j =$		1	2	3	4	5		

Tabela 1.1: Tabela contendo as constantes utilizadas no método de Runge-Kutta 45, construído por Cash e Karp.

Uma maneira bastante utilizada do método de Cash-Karp consiste no seguinte algoritmo. Em determinado passo, calcula-se a estimativa para o próximo valor de h_{n+1} através da equação (1.35):

$$h_{\text{nov}} = h \left| \frac{\varepsilon}{\varepsilon_c} \right|^{0,2}.$$

Daí temos duas possíveis ações:

- caso o valor de ε_c seja maior do que ε , a equação acima nos diz quanto temos que reduzir o valor de h ao *repetir* o passo atual. Isto implica em descartar o passo atual!
- Caso o valor de ε_c seja menor do que ε , o passo atual é mantido e a equação acima nos diz quanto o valor de h pode ser aumentado com segurança para o *próximo* passo.

No caso de termos várias equações diferenciais acopladas, o valor de h_{nov} escolhido deverá ser o menor deles.

1.6 Métodos Multi-passos

Nos métodos de resolução numérica vistos até agora, quase sempre precisávamos somente do valor da função x em uma única posição anterior $x_i(t_i)$. Entretanto, podemos utilizar métodos que lançam mão dos valores de função encontrados em outros passos também. Desde as possíveis abordagens, aquela mais utilizada consiste no chamado método multi-passo linear. Em geral, métodos multi-passos podem obter resultados melhores, para os mesmos números de passos, do que métodos que utilizam somente um único passo, uma vez que a informação da função em posição dos passos anteriores

é utilizada para o cálculo da função em posições posteriores. Em particular, no método linear multi-passo o cálculo da função na posição anterior é expresso como uma combinação linear dos valores da função nos passos anteriores. Em geral, temos:

$$x_{n+1} = \sum_{j=0}^m \alpha_j x_{n+1-j} - h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{n+1-j}, \quad (1.42)$$

onde α_j e β_j são constantes, x_n é a função no n -ésimo passo temporal e $f_n = f(t_n, x_n)$. Temos que m é a ordem do polinômio utilizado para o cálculo da função em $n + 1$. Examinaremos agora o método multi-passo linear mais utilizado para a solução de EDOs.

1.6.1 Método de Adams-Bashforth

A ideia por trás do método de Adams-Bashforth consiste em se resolver a equação principal da EDO (1.1) através da integração da mesma, resultando em:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t', x(t')) dt'. \quad (1.43)$$

Se pudermos integrar a equação acima analiticamente, não precisaremos nos preocupar com nenhum método numérico. Entretanto, para a maioria dos casos poderíamos aproximar a equação $f(t, x)$ por um polinômio $\phi(t)$ e, como qualquer polinômio pode ser integrado analiticamente, poderemos encontrar uma solução aproximada para a ODE:

$$x(t_{n+1}) \approx x(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi(t') dt'.$$

Para o caso em que $\phi(t) = f(t_n)$, temos:

$$x(t_{n+1}) \approx x(t_n) + hf_n.$$

Em termos da equação (1.42), temos as seguintes constantes: $\alpha_1 = 1$, $\beta_1 = 1$ e $\beta_j, \alpha_j = 0$ para $j = 0$.

Podemos agora considerar o método de Adams-Bashforth para dois passos. Neste caso, a condição que temos é que $\phi(t_{n-i}) = f(t_{n-i}) = f_{n-i}$ para $i = 0, 1$. A função linear que produz este resultado está expressa abaixo:

$$f(t, x) \approx \phi(t) = f(t_n) + \frac{f(t_n) - f(t_{n-1})}{t_n - t_{n-1}}(t_n - t).$$

Voltado à equação (1.43) temos:

$$x(t_{n+1}) \approx x(t_n) + \left[f(t_n)t + \frac{f(t_n) - f(t_{n-1})}{t_n - t_{n-1}} \frac{(2t_n t - t^2)}{2} \right]_{t_n}^{t_{n+1}} \quad (1.44)$$

$$x(t_{n+1}) \approx x(t_n) + h \left(\frac{3}{2}f(t_n) - \frac{1}{2}f(t_{n-1}) \right) \quad (1.45)$$

Assim, temos:

$$x_{n+1} = x_n + h \left(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1} \right),$$

que também pode ser expressa em termos da equação (1.42) se $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 0$, $\beta_1 = 3/2$, $\beta_2 = -1/2$ e $\beta_j, \alpha_j = 0$ para $j = 0$.

Continuando desta maneira, podemos construir o método de Adams-Bashforth para m passos se interpolarmos f através de m pontos previamente obtidos: $t = t_{n-0}, t_{n-1}, t_{n-2}, \dots, t_{n-m+1}$. Este processo é feito utilizando-se um polinômio de grau $< m - 1$, de maneira que $\phi(t_{n-i}) = f(t_{n-i})$ para $i = 0, 1, \dots, m - 1$ e integrando o mesmo.

Para que possamos começar a utilizar a expressão acima, temos que ter m pontos iniciais. Caso estes pontos não sejam fornecidos, podemos utilizar um método de passo único (como Runge-Kutta de mesma ordem, por exemplo) para produzir estes pontos iniciais.

Para os próximos valores de m temos:

$$\begin{aligned} m = 3 \quad x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{12} [23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}] \\ m = 4 \quad x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{24} [55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] \\ m = 5 \quad x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{720} [1901f_n - 2774f_{n-1} + 2616f_{n-2} + \\ &\quad -1274f_{n-3} + 251f_{n-4}] \\ m = 6 \quad x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{1440} [4277f_n - 7923f_{n-1} + \\ &\quad +9982f_{n-2} - 7298f_{n-3} + 2877f_{n-4} - 475f_{n-5}] \end{aligned}$$

É importante ressaltar que o erro local do método de Adams-Bashforth de m multi-passos é da ordem de $\mathcal{O}(h^{m+1})$.

1.6.2 Método de Adams-Moulton

O método de Adams-Moulton é similar ao método de Adams-Bashforth no que se refere aos valores de $\alpha_0 = -1$ e $\alpha_i = 0$, para $i = 1, \dots, k - 1$. Os valores de β são escolhidos, como anteriormente, para obtermos o maior grau possível para a expressão de $\phi(t)$. Entretanto, aqui temos um método implícito, que é obtido quando levamos em consideração a função f no ponto sendo examinado (na prática, quando $j = -1$). Temos abaixo as equações

para a equação resultando para até os primeiros 5 passos:

$$\begin{aligned}
 m = 1 \quad x_{n+1} &= x_n + hf_{n+1} \\
 m = 2 \quad x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{2} (f_{n+1} + f_n) \\
 m = 3 \quad x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{12} [23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}] \\
 m = 4 \quad x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{24} [55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] \\
 m = 5 \quad x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{720} [1901f_n - 2774f_{n-1} + 2616f_{n-2} + \\
 &\quad -1274f_{n-3} + 251f_{n-4}] \\
 m = 6 \quad x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{1440} [4277f_n - 7923f_{n-1} + \\
 &\quad +9982f_{n-2} - 7298f_{n-3} + 2877f_{n-4} - 475f_{n-5}]
 \end{aligned}$$

O erro local do método de Adams-Moulton de m multi-passos é da ordem de $\mathcal{O}(h^{m+2})$.

1.6.3 Previsão-Correção em Métodos Multi-Passos

Uma forma bastante utilizada de resolução de ODEs consiste em se utilizar um método explícito de resolução numérica (por exemplo, o método de Adams-Bashforth - AB) para se obter uma previsão para o valor de x_{i+1}^p , e usar este valor em um método implícito (por exemplo, o método de Adams-Moulton - AM) para se obter o valor de x_{i+1} corrigido. Em geral se utilizam o método de AB de grau $m + 1$ em conjunto com o método de AM de grau m , para que os erros sejam da mesma ordem.

1.6.4 Passo Variável em Métodos Muti-Passos

O esquema da previsão-correção (seção anterior) claramente conduz à ideia de que a diferença entre o valor predito e o valor corrigido possam ser usados de alguma forma como uma estimativa do erro corrente, podendo-se vislumbrar um esquema onde o valor de h possa ser recalculado à medida que é feita a integração do problema. Em particular, podemos definir o erro corrente como sendo:

$$\epsilon_c = \left| \frac{y_{i+1} - y_{i+1}^p}{y_{i+1}^p} \right|,$$

e o novo h seria calculado como descrito na equação (1.34). Vale ressaltar que utilizar um passo variável em um método multi-passo é custoso computacionalmente, porque os valores de f devem ser igualmente espaçados, o que

faz com que todos os valores de f_n anteriores tenham que ser recalculados por outro método, por exemplo RK4.

1.7 Erro Numérico Global

Existem inúmeras possíveis fontes de erro na resolução numérica de equações diferenciais ordinárias. Algumas delas têm a ver com a implementação incorreta do método, ou com possíveis erros de programação por parte do usuário. Outra fonte de erro é o já conhecido problema de truncamento, que ocorre quando algumas das variáveis utilizadas no método ou sua variação é menor do que a precisão do tipo de variável utilizado.

Excetuando-se os itens descritos acima, existem ainda os erros locais e globais. Erros locais são aqueles resultantes do truncamento da série de Taylor utilizada no cálculo das funções das EDO no tempo/posição seguinte, em função do tempo/posição atuais, em cada passo da integração da EDO.

Erro global seria o resultado da acumulação dos erros locais, durante a integração da EDO por uma sequência finita de pequenos deslocamentos de tempo/posição.

Por exemplo, consideremos um método que possui erro local da ordem $\mathcal{O}(h^m)$. Assim, após uma sequência de n passos esperaríamos ter um erro global Err_{global} da ordem de:

$$Err_{global} \propto n \mathcal{O}(h^m) = \frac{\Delta t_{total}}{h} \mathcal{O}(h^m) \propto \mathcal{O}(h^{m-1}).$$

Assim sendo, espera-se que o erro global varie com h^{m+1} quando o erro local variar com h^m .

1.8 Atividades Sugeridas

1. O decaimento radioativo pode ser modelado pela seguinte expressão: $dN/dt = -\lambda N$, onde N é o número de átomos de determinada espécie radioativa e λ é o chamado coeficiente de decaimento radioativo.
 - (a) Faça um programa que integre a equação do decaimento radioativo usando o método de Euler explícito. Sugestão: Use $N_0 = 1000$, $\lambda = 0.1$, $\Delta t = 5$ e integre até um tempo final $t_f=50$. Porque essa escolha de Δt ?
 - (b) Com os mesmos parâmetros e usando agora o método de Euler implícito, integre novamente a equação do decaimento radioativo.
 - (c) Grafique os resultados dos métodos anteriores e compare com a solução exata $N = N_0 e^{-\lambda t}$. O que você conclui? Como você interpreta essas diferenças? O que ocorreria se diminuíssemos o intervalo de tempo Δt ? Com base nesses resultados você poderia propor um método com resultados mais próximos ao analítico com o mesmo passo de tempo?

Referências Bibliográficas

- [1] PRESS, WILLIAM H.; TEUKOLSKY, SAUL A.; VETTERLING, WILLIAM T.; FLANNERY, BRIAM P. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. 3a Ed. Nova Iorque:Cambridge University Press, 2007.
- [2] SCHERER, CLÁUDIO. *Métodos Computacionais da Física*. 2a Ed., São Paulo:Livraria da Física, 2010.
- [3] GOULD, H.; TOBOCHNIK, J. *An Introduction to Computer Simulation Methods*, Addison Wesley, 1997.
- [4] ISAACSON, EUGENE.; KELLER, HERBERT BISHOP. *Analysis of Numerical Methods*, Nova Iorque:Wiley, 1994.
- [5] BURDEN, RICHARD L.; FAIRES, J. DOUGLAS. *Numerical Analysis*, 9a Ed., Brooks/Cole, 2010.
- [6] CREIGHTON, JOLIEN. *Lecture Notes for Physics 801: Numerical Methods*, Disponível em: <http://www.lsc-group.phys.uwm.edu/~joliien/Physics-801/Phys-801.pdf>. Acesso em 26 de agosto de 2015.
- [7] CASH, J. R.; KARP, A. H. *ACM Transactions on Mathematical Software*, vol. 16, pp. 201-222, 1990.

CAPÍTULO 2

Mapas

Mapa é um termo utilizado em matemática que pode designar, entre outras coisas, uma função ou família de funções cujas propriedades são importantes para determinado assunto. Entre as mais diversas aplicações de mapas, aquela mais estudada é sem dúvida o chamado mapa logístico.

2.1 Mapa Logístico

O mapa logístico é uma relação de recorrência muito utilizada para mostrar como um comportamento caótico pode surgir mesmo da dinâmica de equações não-lineares relativamente simples. O mapa foi bastante popularizado depois da publicação de um artigo do biólogo Robert May na revista *Nature*. Neste artigo, Robert May descreve modelos matemáticos simples para modelar a dinâmica populacional através de uma escala discreta no tempo. Matematicamente, o mapa logístico pode ser descrito como:

$$x_{n+1} = 4\lambda x_n(1 - x_n). \quad (2.1)$$

Esta equação não-linear tenta descrever dois efeitos populacionais:

- reprodução, onde a população aumenta a uma taxa proporcional à população atual, para tamanhos populacionais pequenos;
- decréscimo ou mortalidade da população para tamanhos populacionais maiores, onde a taxa de mortalidade depende do tamanho atual.

Entretanto, para que a equação (2.1) tenha significado real, os valores de x não podem ser negativos. Para tanto, o domínio da equação que pode

ser utilizado para os estudos populacionais tem que estar restrito à região $[0,1]$.

A equação (2.1) têm as características mencionadas nos itens acima, uma vez que o crescimento populacional é proporcional ao tamanho atual da população ($x_{n+1} \propto x_n$), ao mesmo tempo em que há um decréscimo da população para valores populacionais altos ($x_{n+1} \propto (1 - x_n)$).

O comportamento geral da equação (2.1) pode ser visto na figura (2.1).

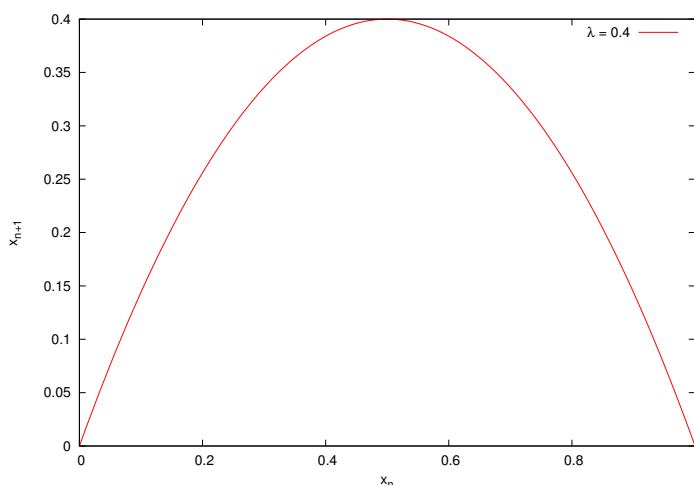


Figura 2.1: Mapa logístico, com $\lambda = 0,4$.

Algumas características da equação (2.1) podem ser obtidas facilmente. Por exemplo, o ponto de máximo da curva $f(x)$ é dado por:

$$f'(x) = 4\lambda(1 - 2x_n) = 0 \rightarrow x_n = 0,5,$$

ou seja, o valor máximo da curva ocorre no meio do intervalo, independentemente do valor de λ . O valor máximo da curva $f(x)$ é dado, portanto, por:

$$f(x = 0.5) = 4\lambda 0.5(1 - 0.5) = \lambda.$$

O valor mínimo de λ pode ser obtido para $x_{n-1} = 0$:

$$f(x) = 0 = 4\lambda x_n(1 - x_n) \rightarrow \lambda = 0,$$

para qualquer x_n diferente de zero. O valor máximo de λ pode ser obtido de maneira análoga, quando $x_{n+1} = 1$:

$$f(x) = 1 = 4\lambda x_n(1 - x_n) \rightarrow \lambda = 1.$$

Em geral, se está interessado em qual é o valor assintótico para o qual x converge, após um intervalo de tempo grande.

2.2 Estabilidade para $\lambda < 0,25$

Pode-se mostrar facilmente que $x = 0$ é uma solução assintótica da equação do mapa logístico para qualquer valor inicial x_0 , quando λ é menor do que 0,25. Isto ocorre porque a equação do mapa logístico pode ser rearranjada como:

$$x_{n+1} = x_n [4\lambda] [(1 - x_n)], \quad (2.2)$$

e as duas quantidades entre colchetes têm valores no intervalo $[0,1]$, o que faz com que o valor de x_{n+1} diminua assintoticamente de qualquer valor inicial até zero. A figura (2.2) ilustra este fato ao mostrar o valor de x_n para valores incrementais de tempo, tendo diferentes valores iniciais e diferentes valores de λ

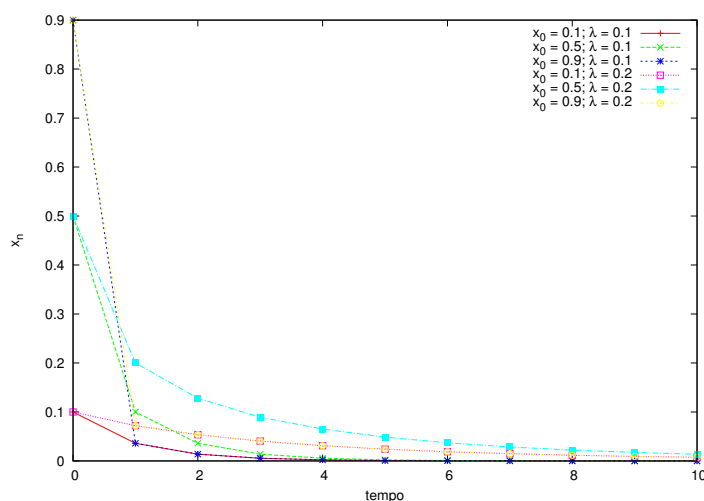


Figura 2.2: Mapa logístico em função do tempo discreto t para valores iniciais $x_0 = 0,1; 0,5$ e $0,9$ e $\lambda = 0,1$ e $0,2$.

Portanto, $x = 0$ é um ponto-fixo da equação do mapa-logístico. Podemos testar a estabilidade deste ponto-fixo: para que ele seja estável temos que $|f'(x = 0)| < 1$, ou seja:

$$|f'(x = 0)| = |4\lambda[1 - 2(0)]| < 1,$$

ou seja, $\lambda < 0,25$ para que tenhamos a estabilidade.

2.3 Estabilidade para $0,25 < \lambda < 0,75$

Para os casos em que λ é maior do que 0,25 mas menor do que 0,75, a solução assintótica de x_{n+1} varia sucessivamente para valores cada vez maiores de x . Isto pode ser visto na figura (2.3), onde temos a representação dos valores de x_{n+1} para alguns valores de x_0 e λ , dentro do limite descrito acima.

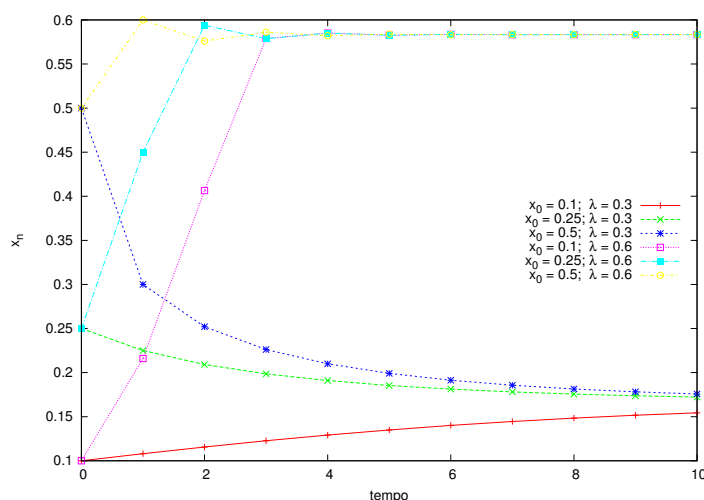


Figura 2.3: Mapa logístico em função do tempo discreto t para valores iniciais $x_0 = 0, 1; 0, 5$ e $0, 9$ e $\lambda = 0,3$ e $0,6$.

Podemos testar a estabilidade destes pontos fixos através do sistema:

$$\begin{cases} x = x 4\lambda(1-x) \\ 1 > |4\lambda(1-2x)| \end{cases} \quad (2.3)$$

Podemos isolar λ na primeira equação ($\lambda = 1/[4(1-x)]$), e substituir na segunda, resultando em:

$$\left| \frac{(1-2x)}{(1-x)} \right| < 1. \quad (2.4)$$

Daí temos dois casos: quando o termo à esquerda é positivo ou negativo. No primeiro caso é fácil de se mostrar que só teremos solução quando:

$$\left\{ x = 0; \lambda = \frac{1}{4} \right\}.$$

Este é justamente o caso limite superior de $x = 0$. Quando o termo à esquerda da equação (2.4) for negativo, teremos:

$$\frac{(1-2x)}{(1-x)} < -1,$$

que resulta, depois de um pouco de álgebra, em:

$$\left\{ x < \frac{2}{3}; \lambda < \frac{3}{4} \right\}.$$

Em resumo, com λ entre 0,25 e 0,75, teremos que x_{n+1} tende assintoticamente a valores cada vez maiores de x , entre 0 e $2/3$. Estes valores de x são pontos-fixos estáveis. Os valores dos pontos fixos podem ser facilmente encontrados de forma gráfica, pois eles se encontram na intersecção entre as curvas $x_{n+1} = x_n 4\lambda(1 - x_n)$ e $x_{n+1} = x_n$ (já que quando $x_{n+1} = x$ os próximos valores de x serão sempre iguais). Por exemplo, a figura (2.3) mostra os gráficos correspondentes para $\lambda = 0,6$. Podemos ver graficamente que o valor assintótico está ao redor de 0,58. O valor numérico pode ser facilmente encontrado por:

$$1 = 4(0,6)(1 - x) \rightarrow x = 7/12 \sim 0,58333\dots$$

2.4 $\lambda > 0,75$ e o Limite Cíclico

Para valores de λ maiores do que 0,75, vemos que não ocorre um ponto-fixo estável, conforme mostrado na seção anterior. Entretanto, podemos procurar por pontos fixos de ordem maior, em outras palavras, podemos procurar por valores de x que se repetem de forma cíclica mas não consecutiva. Por exemplo, pontos-fixos de segunda ordem são pontos em que $x_{n+2} = x_n$. O valor de $x_{n+2} \equiv f(f(x))$ é dado por:

$$f(f(x)) = [x_n 4\lambda(1 - x_n)] 4\lambda \{1 - [x_n 4\lambda(1 - x_n)]\} = 16(1 - x_n)x_n\lambda^2(1 - 4(1 - x)x\lambda).$$

Os pontos fixos de segunda ordem que são encontrados ao se resolver a equação acima são visitados ciclicamente no limite assintótico. Matematicamente, para calcularmos os pontos fixos de segunda ordem temos que resolver o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} x = f(f(x)) \\ 1 > |f'(f(x))| \end{cases} \quad (2.5)$$

Pode-se mostrar que a única solução do sistema acima que tem relevância para o caso específico do estudo do mapa logístico mostra que $0,75 < \lambda < (1 + \sqrt{6})/4 = 0,86237$.

A figura (2.4) mostra o plot de x_{n+1} para $x_0 = 0,25$ e $\lambda = 0,8$, mostrando a repetição cíclica dos valores assintóticos de x_n para grandes valores de t .

A figura (2.5) ilustra a obtenção gráfica dos dois valores assintóticos de x para o caso em que $\lambda = 0,8$. Note que há um terceiro ponto-fixo (entre os

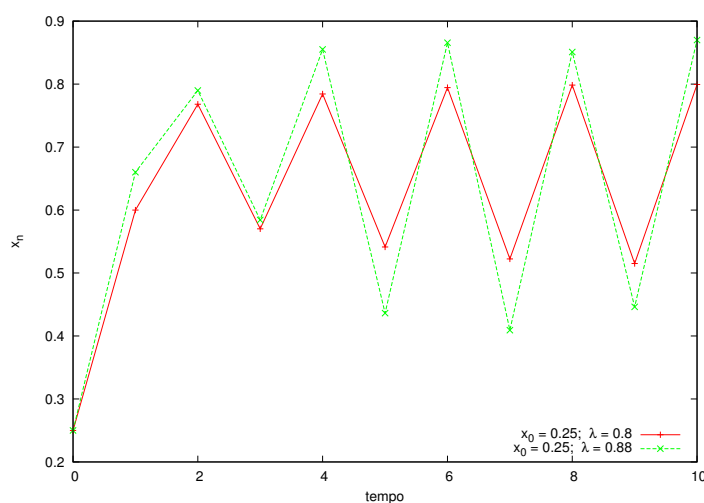


Figura 2.4: Mapa logístico em função do tempo discreto t para valores iniciais $x_0 = 0,25$ e $\lambda = 0,8$ e $0,88$.

dois valores extremos) que corresponde ao caso em que temos ponto-fixo de primeira ordem $f(x) = x$. Os valores assintóticos de x neste caso, obtidos matematicamente, são $0,513045$ e $0,799455$.

Podemos continuar procurando por ciclos maiores. Por exemplo, um ponto-fixo de 4 ciclos surge quando $f(f(f(f(x)))) = x$. Pode-se mostrar que este ponto-fixo se torna instável para $\lambda > 0,886023$. Já o ponto-fixo de 8 ciclos se torna instável para $\lambda > 0,891102$.

De maneira geral, podemos notar que à medida que λ aumenta à partir de $0,75$:

- o número de ciclos visitados pelo mapa logístico aumenta gradativamente;
- o transiente necessário para que se estabeleça o ciclo também aumenta paulatinamente;
- a bifurcação do número de ciclos ocorre cada vez para variações menores de λ .

2.5 $\lambda > 0,89$ e o Limite Caótico

Conforme visto na seção anterior, espera-se que à medida que λ se aproxima de 1, tanto o número de ciclos quanto o transiente até o ponto-fixo aumentem cada vez mais. Este comportamento pode ser observado na figura (2.6).

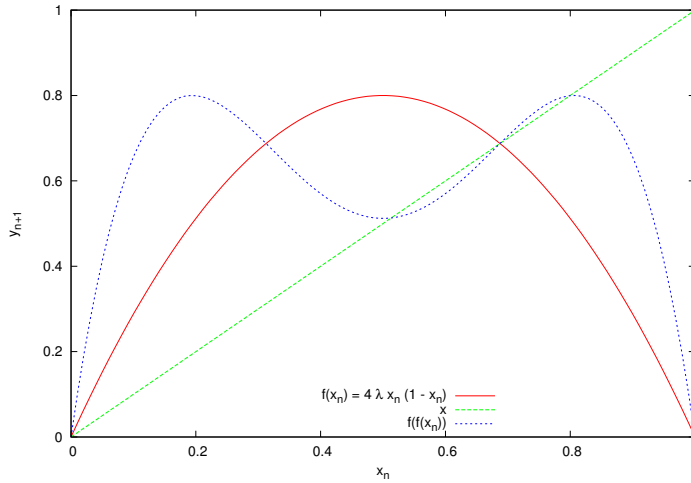


Figura 2.5: Mapa logístico em função do tempo discreto t para $\lambda = 0,8$. Também estão ilustradas as curvas $y = x$ e $y = f(f(x))$. Podemos notar a presença de um ponto-fixo de primeira-ordem instável (que ocorre quando $f(x) = x = 0,6875$, na intersecção entre as 3 curvas) e dois pontos fixos de segunda ordem (que ocorrem em $f(f(x)) = x = 0,513045$ e $0,799455$, que ocorrem na intersecção de $f(f(x))$ e $y = x$).

Note o aumento da complexidade do comportamento à medida que $\lambda > 0,89$. É bastante visível o momento em que o tamanho dos ciclos dobra à medida que λ aumenta, até atingirmos um transiente caótico.

Em particular, os valores de λ em que o período dobra formam uma série cujos primeiros números são:

$$\lambda_0 = \frac{1}{4}; \lambda_1 = \frac{3}{4}; \lambda_2 = \frac{1 + \sqrt{6}}{4}; \lambda_4 = 0,8860; \dots$$

Valores sucessivos de $(\lambda_k - \lambda_{k-1})$ formam uma progressão geométrica de forma que podemos definir:

$$\delta_F = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\lambda_k - \lambda_{k-1}}{\lambda_{k+1} - \lambda_k} = 4,6692\dots \quad (2.6)$$

onde δ é conhecida como constante de Feigenbaum. Esta constante é considerada “universal” e aparece em diversas séries, não somente no mapa logístico.

2.6 Mapas de Teia e Mapas de Primeiro Retorno

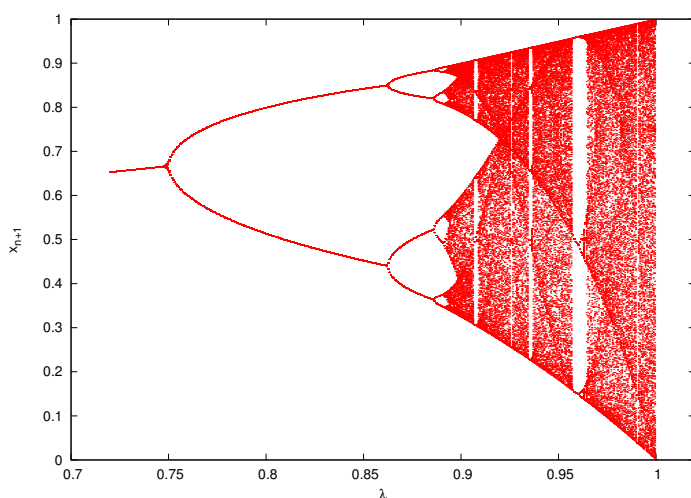


Figura 2.6: Valores assintóticos de x para diferentes valores de λ . O gráfico apresenta os últimos 400 pontos calculados por λ , depois de calcular 700 pontos. Os valores de λ variam de 0,72 até 1, em uma malha de 400 valores.

Uma maneira de se visualizar a dinâmica dos valores de x é através dos chamados mapas de teia. Neste caso, plotamos o gráfico da função logística (2.1) e da função $y = x$. Os gráficos do tipo teia são construídos unindo-se os seguintes pontos (x, y) :

$$\begin{aligned} & x_0 \ 0 \\ & x_0 \ x_1 \\ & x_1 \ x_1 \\ & x_1 \ x_2 \\ & x_2 \ x_2 \\ & x_2 \ x_3 \\ & \dots, \end{aligned}$$

conforme pode ser visto na figura (2.7).

Outro tipo de visualização dos resultados do mapa logístico é utilizar os mapas de recorrência. Estes são construídos através de uma matriz M_{ij} , onde os elementos desta matriz são definidos como:

$$M_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } |x_i - x_j| < \epsilon \\ 0, & \text{em caso contrario} \end{cases},$$

onde ϵ é um número arbitrário pequeno o suficiente. Temos um exemplo do mapa de recorrência na figura (2.8).

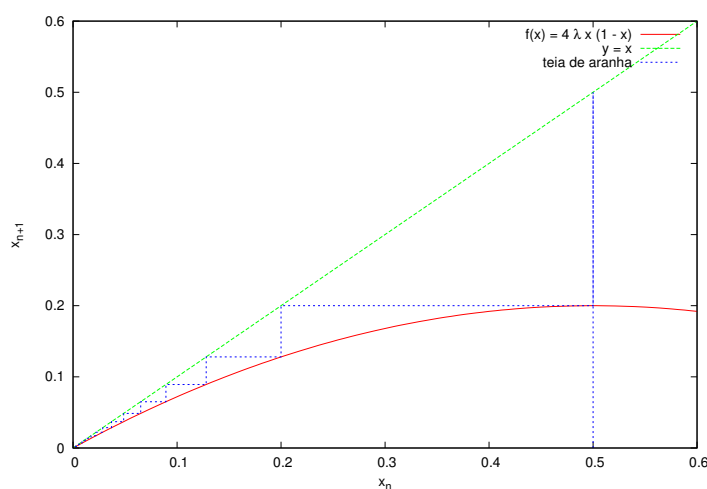


Figura 2.7: Mapa do tipo teia para o valor inicial $x_0 = 0,5$ $\lambda = 0,2$.

2.7 Coeficiente de Lyapunov

A assinatura de um sistema caótico é a sensibilidade quanto às condições iniciais. Se duas trajetórias iniciam muito próximas entre si, e a distância delas aumenta com o tempo, se diz que o sistema é caótico. A taxa com que as distâncias entre duas trajetórias aumenta com o tempo é caracterizada por uma quantidade chamada expoente de Lyapunov.

Consideremos duas trajetórias que iniciam, correspondentemente, nas posições x_0 e $x_0 + \delta$. As duas trajetórias se relacionam através dos valores de x seguintes: $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ e, correspondentemente, $x_0 + \delta, x_1 + \delta_1, x_2 + \delta_2, \dots, x_n + \delta_n$. Assumindo que δ_n é pequeno, podemos expandir $f(x)$ ao redor de x_n , obtendo:

$$f(x_n + \delta_n) = f(x_n) + f'(x_n)\delta_n \rightarrow x_{n+1} + \delta_{n+1} = x_{n+1} + f'(x_n)\delta_n,$$

que resulta em:

$$\delta_{n+1} = f'(x_n)\delta_n.$$

Podemos utilizar esta forma recursiva para obtermos a razão entre a distância entre as duas trajetórias após n passos (δ_n) e a distância inicial (δ_0):

$$\left| \frac{\delta_n}{\delta_0} \right| = \prod_{i=0}^{n-1} |f'(x_i)|.$$

Assumindo que a quantidade acima varie exponencialmente para valores

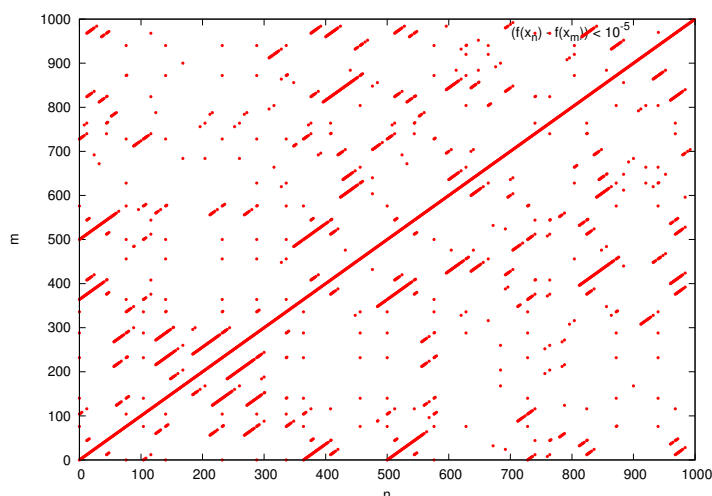


Figura 2.8: Mapa de recorrência para o valor inicial $x_0 = 0,5$ $\lambda = 0,895$. Neste caso $\epsilon = 10^{-5}$.

grandes de n , temos:

$$\left| \frac{\delta_n}{\delta_0} \right| = e^{\lambda_L n},$$

onde λ_L é o chamado expoente de Lyapunov, definido como:

$$\lambda_L \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln |f'(x_i)|. \quad (2.7)$$

Se $\lambda_L > 0$, então as trajetórias vizinhas se distanciam umas das outras para grandes valores de n e temos o comportamento caótico. Entretanto, se as trajetórias convergem para um valor fixo ou um limite cíclico, elas se aproximam, o que resulta em $\lambda_L < 0$.

Podemos visualizar o coeficiente de Lyapunov calculado para alguns valores de λ na figura (2.7). Fica claro pela figura que o comportamento caótico surge ao redor de 0,9. Pode-se notar que em alguns pontos durante a fase que ainda não se tornou caótica, a curva do coeficiente se aproxima de zero, como por exemplo ao redor de 0,75: estes são os pontos de bifurcação do mapa logístico, onde o sistema está na iminência de se tornar caótico, cujo efeito é removido pela bifurcação. Outro comportamento que pode ser notado pela figura é o fato de haver, mesmo durante a fase caótica, “ilhas” de estabilidade, em que o coeficiente de Lyapunov chega a ficar negativo.

2.8 Mapa de Hénon

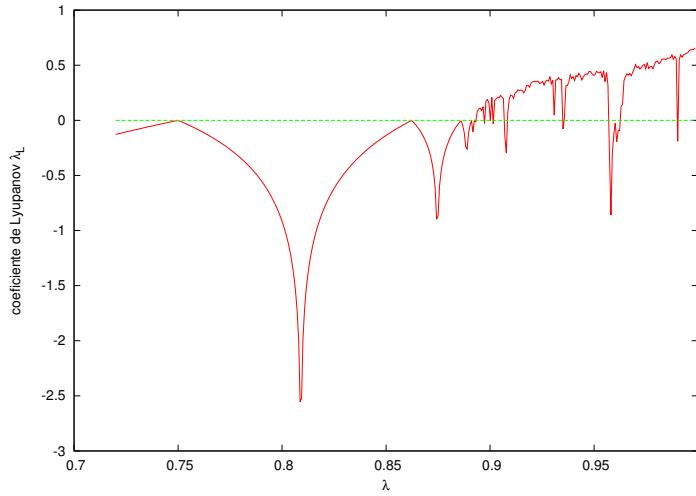


Figura 2.9: Coeficiente de Lyapunov como função de λ . Coeficiente calculado para $x_0 = 0.5$, para séries até $n=700$ desprezando-se os primeiros 300 valores de x_n . O coeficiente λ foi calculado para 400 valores diferentes, igualmente espaçados entre $\lambda = 0,72$ e $\lambda = 1$.

O mapa não-linear bidimensional mais estudado é sem dúvida alguma o mapa de Hénon. Ele foi proposto pelo astrônomo francês Michel Hénon como um protótipo para o estudo de caos em sistemas dinâmicos. Ele é definido como:

$$x_{n+1} = a - x_n^2 + y_n \quad (2.8)$$

$$y_{n+1} = b x_n, \quad (2.9)$$

onde a e b são dois parâmetros.

A análise de pontos fixos $(x^*; y^*)$ é feita utilizando-se a definição de ponto-fixa:

$$x^* = a - (x^*)^2 + y^* \quad (2.10)$$

$$y^* = b x^*. \quad (2.11)$$

Este sistema de equações pode ser facilmente rearranjado resultando em uma equação de segundo grau: $(x^*)^2 + x^*(1 - b) - a = 0$. A solução desta equação para x^* é:

$$x^* = \frac{(b - 1) \pm \sqrt{(1 - b)^2 + 4a}}{2}.$$

Para que tenhamos soluções reais, temos que:

$$a \geq -\frac{(1 - b)^2}{4}.$$

2.9 Atividades Sugeridas

1. Calcule os primeiros 20 valores de x_n para os seguintes valores de λ : 0,1; 0,2; 0,3; 0,6 e x_0 : 0,1; 0,25 e 0,5 e encontre os valores assintóticos. Grafique as séries em pequenos conjuntos comparando aquelas que têm o mesmo valor de λ e x_0 . Compare estes valores com aqueles esperados pela teoria.
2. Produza os gráficos de x_n em função de t , de teia e de recorrência para λ : 0,89; 0,8925 e 0,895, com $x_0 = 0,5$ e $t_{max} = 1000$. Tente encontrar visualmente as evidências: a) que indiquem o fim da fase de transiente e b) a fase caótica.
3. Calcule séries com os primeiros 700 valores de x_n para 400 diferentes valores igualmente espaçados de λ começando em 0,72 até 1,0. Ignore os primeiros 300 valores de cada série (supondo que após estes 300 valores a fase transiente já tenha acabado), colocando os outros 400 valores em um arquivo único contendo as seguintes colunas: λ e x_n . Plote e analise o gráfico resultante, identificando visualmente as bifurcações e a transição entre as fases assintóticas e caótica. O gráfico resultante será semelhante ao apresentado na figura (2.6).
4. Utilize o algoritmo da atividade anterior para calcular o valor do expoente de Lyapunov (equação 2.7) em função de λ e da constante de Feigenbaum (equação 2.6) para o mapa logístico.
5. Utilize o mapa de Hénon para plotar o gráfico de x versus y para os seguintes parâmetros $(a; b)$: (0,2; 0,9991), (0,2; -0,999); (1,4; 0,3).
6. Utilize o gnuplot para fazer um filme do mapa de Hénon onde o intervalo de $a = \{-1 : 1\}$ é varrido em 10^3 partes com $b = -0,999$. Para cada conjunto de parâmetros gere 10^4 pares x, y desprezando os 1000 primeiros. Para descobrir como gerar o filme de dentro de seu programa, digite "help plot special-filenames" no gnuplot e procure por "plot '-'".

Referências Bibliográficas

- [1] YOUNG, PETER. *The Logistic Map*. Disponível em: <http://physics.ucsc.edu/~peter/242/logistic.pdf>. Acesso em: 26 de maio de 2015.
- [2] CLARK JR, ALFRED. *Tent Map*. Disponível em: <http://www.me.rochester.edu/courses/ME406/webexamp5/tent.pdf>. Acesso em: 26 de maio de 2015.
- [3] AL-SHAMERI, WADIA F. H; MAHIUB, MOHAMMED A. *Some Dynamical Properties of the Family of Tent Maps*. Disponível em: <http://www.m-hikari.com/ijma/ijma-2013/ijma-29-32-2013/alshameriIJMA29-32-2013.pdf>. Acesso em: 26 de maio de 2015.
- [4] STEMLER, THOMAS. *Dynamic Systems and Chaos*. Disponível em: <http://staffhome.ecm.uwa.edu.au/~00062643/2011/3A7/Slides8.pdf>. Acesso em: 26 de maio de 2015.

CAPÍTULO 3

Números Aleatórios e Método de Monte Carlo

Como vimos anteriormente, mesmo sistemas dinâmicos completamente determinísticos podem apresentar comportamento caótico, onde dois sistemas diferentes cujo estado inicial sejam muito parecidos, exibem comportamento cada vez mais descorrelacionado, de forma que após um certo intervalo de tempo os dois sistemas apresentam comportamentos completamente diferentes. Em situações reais na natureza, o número de diferentes variáveis que influenciam o comportamento dinâmico de sistemas, mesmo os mais simples, é imenso. Caso a influência externa que age sobre um sistema dinâmico seja importante o suficiente a ponto de modificar o comportamento do sistema e, além disso, caso esta influência externa tenha carácter estocástico, o resultado do comportamento do sistema dinâmico pode chegar a ser completamente aleatório. Um exemplo simples é o ato de jogar uma moeda e verificar se a face que fica voltada para cima é cara ou coroa. Poderíamos, a princípio, imaginar que caso se conhecessem todas as forças que agem sobre a moeda no momento do lançamento, seria possível se conhecer o resultado de determinada jogada. Entretanto, o atrito com o ar, as forças que agem sobre a moeda no momento que a mesma toca o solo, as variações mínimas na força do dedo que dá o empurrão na moeda, enfim todos estes efeitos combinados fazem com que a probabilidade de que tenhamos cara ou coroa seja, respectivamente, de 50% e 50% ou algo muito próximo disto dependendo das características físicas da moeda.

3.1 Sequências de Números Aleatórios

Uma sequência de números x_1, x_2, \dots é dita aleatória ou randômica quando duas propriedades básicas são observadas: uniformidade e independência.

A uniformidade indica que os números da sequência são obtidos através de uma função de probabilidade uniforme $f(x)$:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x_{min} \leq x \leq x_{max} \\ 0, & \text{outro valor,} \end{cases}$$

entre os valores limites da série x_{min} e x_{max} ; como exemplo típico podemos considerar números aleatórios reais gerados entre 0 e 1.

A propriedade de independência ocorre quando a sequência de números é completamente aleatória, ou seja, um dado valor x_i pode ser escolhido com igual probabilidade dentro do intervalo x_{min} e x_{max} independente dos valores anteriores da série x_{i-1}, x_{i-2}, \dots

3.1.1 Características de Geradores de Números Aleatórios

O método mais simples de gerar uma sequência de números aleatórios é através do chamado *gerador congruente*. Neste tipo de algoritmo, determinado número aleatório é gerado através de uma função cujos argumentos são os últimos números aleatórios gerados anteriormente:

$$x_{i+1} = f(x_i, x_{i-1}, \dots). \quad (3.1)$$

Por este motivo, costuma-se dizer que os números aleatórios gerados a partir de um gerador congruente são, na verdade, *pseudo-aleatórios*. Alguém que saiba o algoritmo utilizado na geração dos números aleatórios poderá, conhecendo também a série de números gerados anteriormente, conhecer também os próximos valores da série. Entretanto, esta é uma característica benéfica em determinados contextos, por exemplo na simulação computacional que utiliza números aleatórios na atribuição de variáveis específicas e onde deseja-se repetir a simulação e verificar o resultado de pequenas modificações quando a mesma série de números é utilizada nas duas versões. Caso as duas séries utilizadas fossem diferentes seria praticamente impossível de se verificar se os resultados observados na simulação são causados pelas mudanças feitas no algoritmo ou pelo fato de se utilizar outra série de números aleatórios.

Uma característica facilmente verificável é que, uma vez que o i -ésimo número da sequência depende exclusivamente do números gerados anteriormente - e muitas vezes depende somente do $(i - 1)$ -ésimo número gerado -, teremos a partir de determinado ponto a repetição de, pelo menos, parte da série gerada. Dito de outra maneira, embora possamos gerar uma série infinita de números aleatórios segundo a equação (3.2), a série terá repetição cíclica de comprimento C . A distância $L = i - 0$, entre os números x_i e x_0 ,

compreende o que se chama de *cauda*, que é a região transiente da série que ocorre antes que ocorra o primeiro número que caracteriza o início dos ciclos periódicos. Assim, chama-se de *período* de uma série aleatória a distância $L + C$.

$$\{X\} = \overbrace{3, 5, 2}^{\text{cauda } L=3}, \underbrace{1, 9, 8, 7}_{\text{região cíclica } C=4}, 1, 9, 8, 7, 1, \dots$$

Figura 3.1: Sequência de números aleatórios entre 1 e 9, mostrando a região da cauda, a região cíclica. O período desta sequência é $L + C = 7$.

Existem características desejáveis aos geradores utilizados em computação:

1. o gerador deve ser simples o suficiente para que seu algoritmo possa ser facilmente implementado e não tome muito tempo computacional para que possa ser executado, uma vez que, dependendo da aplicação, milhões ou mais números aleatórios deverão ser gerados;
2. o período do gerador deve ser grande o suficiente para que dentro de determinada aplicação nunca se atinja o fim do período. Caso isto ocorra, costuma-se considerar que o gerador perde sua utilidade para esta dada aplicação. Isto ocorre pois os números gerados serão repetitivos, fazendo com que ocorram padrões na simulação, podendo influenciar resultados e gerando falsos resultados;
3. os valores sucessivos da sequência devem ser independentes e distribuídos de maneira uniforme.

3.1.2 Geradores Linear de Números Aleatórios Congruentes

No caso mais simples, a função (3.1) depende somente do último número aleatório gerado (x_i). O exemplo mais utilizado deste tipo de função é:

$$x_{i+1} = (a x_i + b) \bmod m, \quad (3.2)$$

onde a , b e m são números naturais e $(w \bmod z)$ é a operação que retorna o resto da divisão entre os números w e z .

Pode-se verificar facilmente que os números da sequência gerada são inteiros e dados pela equação (3.2), distribuídos no intervalo $[0; m-1]$. Para que os números aleatórios gerados estejam no intervalo $[0; 1]$, basta que os números gerados sejam divididos por m .

Verifica-se que do ponto de vista de eficiência computacional de um gerador de números aleatórios do tipo congruente linear devemos observar as seguintes recomendações:

- o módulo de m deve ser grande, uma vez que quanto maior m , maior será o possível período do gerador;
- para que a computação de $(\text{mod } m)$ seja eficiente, m deve ser uma potência de 2, ou seja, $m = 2^k$, onde k é um número natural;
- se b for diferente de zero, o máximo período possível será obtido se, e somente se:
 - todo número inteiro que é fator de m , também é fator de $a - 1$;
 - $a-1$ é múltiplo de 4, se m é múltiplo de 4;

Todas estas exigências são obtidas no caso em que $a = 2^k$, $a = 4c + 1$ e $b = d$, onde k e c são números inteiros positivos e d é um número ímpar.

Há um problema grave relacionado com qualquer gerador de números aleatórios congruentes lineares, uma vez que há uma forte tendência de correlação entre dois valores sorteados consecutivamente. Esta correlação pode ser observada se fizermos um gráfico onde graficamos no eixo das ordenadas o i -ésimo número aleatório sorteado e no eixo das abscissas colocarmos o $(i + 1)$ -ésimo número aleatório sorteado. Este tipo de gráfico produz um padrão de linhas paralelas que depende dos valores de a , b e m escolhidos: quanto mais compacta for a malha de linhas melhor é o gerador de números obtido.

Outro problema que imediatamente fica evidente é o fato de que, dependendo da combinação de valores de a e x_i , a multiplicação destes números na equação (3.2) poderá ser maior do que valor máximo do tipo de variável utilizada, o que seguramente pode causar problemas na distribuição dos números aleatórios utilizadas. Este problema é evitado na implementação do algoritmo de Schrage, descrito abaixo.

3.1.3 Método de Schrage

O método de Schrage consiste em substituir a expressão (3.2), com $b = 0$, por:

$$(ax_i) \text{ mod } m = \begin{cases} a(x_i \text{ mod } q) - r \text{ int}(\frac{x_i}{q}), & \text{se } \geq 0 \\ a(x_i \text{ mod } q) - r \text{ int}(\frac{x_i}{q}) + m, & \text{senão,} \end{cases} \quad (3.3)$$

usando para isto o fato de que m pode ser fatorado da seguinte maneira:

$$m = aq + r,$$

onde $r = m \bmod a$ e $q = \text{int}(m/a)$. O método clássico de Schrage utiliza as constantes $a = 16807$, $m = 2147483647$, $q = 127773$ e $r = 2836$. Este gerador possui período de $2^{31} - 2 \sim 2.1 \times 10^9$. Há, entretanto, um problema com este gerador no fato de que uma vez que um valor pequeno é previamente sorteado, o próximo número aleatório terá valor menor do que a média.

3.2 Histogramas e a Densidade de Probabilidade

Nesta seção veremos a relação entre histogramas e a definição de densidade de probabilidade.

3.2.1 Histogramas

Considere que estamos medindo uma propriedade qualquer X de um conjunto de objetos como, por exemplo, a velocidade dos carros que atravessam determinado cruzamento. Suponha que N seja o número total de medidas realizadas. Uma forma de organizar este conjunto de dados é através da criação de um histograma h . Para tal fim, definimos inicialmente os extremos do histograma, ou seja, o valor mínimo X_{min} e máximo X_{max} da propriedade medida (por exemplo, dois valores que sejam, respectivamente, menor e maior do que as velocidades mínimas e máximas medidas). Em seguida, definimos a quantidade M de intervalos que constituirão o histograma. Agora basta distribuir os N valores medidos da variável X nos M intervalos do histograma. Em outras palavras, para o i -ésimo intervalo do histograma, $h(i)$, basta contar quantos valores do conjunto de medidas estão entre X_i e X_{i+1} , onde:

$$X_i = X_{min} + i \Delta x,$$

e

$$X_{i+1} = X_{min} + (i + 1) \Delta x,$$

com Δx igual a:

$$\Delta x = \frac{x_{max} - x_{min}}{M}.$$

A probabilidade $P(X_i)$ de que uma das N medidas em particular, escolhida ao acaso, esteja no i -ésimo intervalo $h(i)$ é dada por:

$$P(X_i) = \frac{h(i)}{N} \quad (3.4)$$

O valor médio $\langle X \rangle$ das variáveis medidas pode ser facilmente encontrado:

$$\langle X \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_j,$$

onde a soma é realizada sobre todas as N partículas. Entretanto, a mesma média poderia ser igualmente realizada sobre todos os M intervalos do histograma h :

$$\langle X \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^M h(i) X_i. \quad (3.5)$$

uma vez que pode ser facilmente visto que:

$$\sum_{j=1}^N X_j = \sum_{i=1}^M h(i) X_i.$$

Mesmo correndo o risco de sermos repetitivos, vale a pena lembrar que o somatório no lado esquerdo da equação acima é realizado sobre todas as N medidas, enquanto que o somatório no lado direito é realizado sobre todos os M intervalos do histograma.

A equação (3.5) pode ser re-escrita, usando-se a definição (3.4), como:

$$\langle X \rangle = \sum_{i=1}^M \frac{h(i)}{N} X_i = \sum_{i=1}^M P(X_i) X_i. \quad (3.6)$$

De maneira análoga, podemos verificar facilmente que:

$$\langle X^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_j^2 = \sum_{i=1}^M P(X_i) X_i^2. \quad (3.7)$$

De maneira geral temos, para um dado valor k :

$$\langle X^k \rangle = \sum_{i=1}^M P(X_i) X_i^k. \quad (3.8)$$

Neste caso, diz-se que $\langle X^k \rangle$ representa o k -ésimo **momento** da distribuição para os valores de X .

3.2.2 Densidade de Probabilidade

Considere uma função $f(x)$ com a seguinte característica:

$$\int_{x_0}^{x_f} f(x) dx = 1 \quad (3.9)$$

e sob a condição de que

$$f(x) \geq 0, \quad \text{para } x_0 \leq x \leq x_f,$$

onde x_0 e x_f são os pontos iniciais e finais da integração. A partir desta definição, tem-se que a probabilidade $P(x)$ de f ser encontrada dentro do intervalo infinitesimal $[x; x + dx]$ é dada por:

$$P(x) = f(x) dx,$$

para $x_0 \leq x \leq x_f$. Como consequência, a probabilidade $P([a; b])$ de f estar entre dois valores quaisquer a e b é dada por:

$$P([a; b]) = \int_a^b f(x) dx \quad (3.10)$$

para $x_0 \leq (a, b) \leq x_f$ e $a \leq b$. Uma função f com as características acima recebe o nome de *função densidade de probabilidade* (FDP).

Considere agora uma dada função unidimensional bem comportada $g(x)$, com

$$g(x) \geq 0, \quad \text{para } x_0 \leq x \leq x_f.$$

Esta função pode ser transformada em uma função densidade de probabilidade $f dp(x)$ entre os dois limites x_0 e x_f , através da equação:

$$f dp(x) = \frac{g(x)}{\mathcal{N}}, \quad (3.11)$$

onde a normalização \mathcal{N} é dada por:

$$\mathcal{N} = \int_{x_0}^{x_f} f(x') dx'. \quad (3.12)$$

Das definições (3.11) e (3.12), fica claro que a função $f dp(x)$ obedece à definição (3.9), sendo consequentemente uma função densidade de probabilidade também.

Adicionalmente, definimos a *função densidade cumulativa* (FDC) $f dc(x)$ como sendo:

$$f dc(x) \equiv \int_{x_0}^x f dp(x') dx'. \quad (3.13)$$

Fica claro pela definição acima que para $x_0 \leq x \leq x_f$ temos que $0 \leq f dc(x) \leq 1$.

3.2.3 Relação entre histogramas e FDPs

Histogramas e funções densidade de probabilidade são definições que estão intimamente ligadas. Imagine que estamos criando um histograma h a partir de um número N de medidas de determinada propriedade de um grupo numeroso de objetos. Este conjunto de medidas é especificado por $X = \{X_1, X_2, \dots, X_N\}$. Considere que esta propriedade medida não é necessariamente a mesma para todos os corpos, mas segue uma distribuição f

que pode ser, a princípio, desconhecida do indivíduo que as realiza. Assim, o conjunto $\{X\}$ é uma coleção de números aleatórios que seguem a distribuição f . Podemos construir um histograma h , com M partições, a partir deste conjunto de medidas. A partir da equação (3.4) podemos ver que a probabilidade $P(X_i)$ de medirmos o valor X_i para este conjunto de N medidas é dado por $h(X_i)/N$. Desde já fica claro que a função $P(X_i)$ obedece às condições necessárias para ser classificada como uma FDP e, em particular, obedece à equação (3.11). Podemos imaginar o caso limite em que o número de medidas é infinitamente grande, de maneira que $P(X_i)$ ficará cada vez mais semelhante à f . Podemos tomar um segundo caso limite, em conjunto com o primeiro, é considerarmos o número M de divisões do histograma h infinitamente grande. Neste caso, com estas duas condições, podemos, finalmente, considerar que:

$$P(X_i) = \lim_{M,N \rightarrow \infty} \frac{h(i)}{N} = f(X_i) dx.$$

Assim, temos que a média $\langle x \rangle$ é dada por:

$$\langle x \rangle = \int_{x_{min}}^{x_{max}} x f(x) dx$$

e, portanto, $\langle x^k \rangle$, com k sendo um valor inteiro é:

$$\langle x^k \rangle = \int_{x_{min}}^{x_{max}} x^k f(x) dx.$$

Exemplo

Imaginemos que exista em uma sala um número grande de pessoas. A tabela (3.1) apresenta o número de pessoas que possuem determinada idade:

Podemos calcular a idade média ($\langle idade \rangle$) das pessoas através da sala através das seguintes relações:

$$\langle idade \rangle = \frac{15 + 15 + 16 + \dots + 21}{30} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^7 n_i \times (idade)_i, \quad (3.14)$$

onde \mathcal{N} é a normalização, que neste caso é o número total de pessoas (30), e n_i é o número de pessoas com idade dada pelo índice i e $(idade)_i$ é a idade dada pelo índice i .

A equação acima pode ser re-escrita como:

$$\langle idade \rangle = \sum_{i=1}^7 \frac{n_i}{\mathcal{N}} \times (idade)_i = \sum_{i=1}^7 \text{Pr}(idade)_i \times (idade)_i, \quad (3.15)$$

onde $\text{Pr}(idade)_i$ é a probabilidade de determinada pessoa ter a idade $(idade)_i$ no recinto acima. A resposta é 18,1 anos.

índice	número de pessoas	idade	Pr(idade)
1	2	15	2/30
2	3	16	3/30
3	5	17	5/30
4	8	18	8/30
5	6	19	6/30
6	4	20	4/30
7	2	21	2/30

Tabela 3.1: Tabela contendo o número de pessoas que contém determinada idade em um dado recinto hipotético. A última coluna refere-se à probabilidade uma pessoa qualquer escolhida ao acaso neste recinto de ter a idade especificada na segunda coluna. Esta probabilidade é obtida através da equação 3.11.

De forma análoga, caso quiséssemos calcular a idade quadrática média $\langle idade^2 \rangle$ poderíamos usar:

$$\langle idade \rangle = \frac{15^2 + 15^2 + 16^2 + \dots + 21^2}{30} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^7 n_i \times (idade)_i^2, \quad (3.16)$$

que pode ser re-escrito como sendo:

$$\langle idade^2 \rangle = \sum_{i=1}^7 \frac{n_i}{\mathcal{N}} \times (idade)_i^2 = \sum_{i=1}^7 \text{Pr}(idade)_i \times (idade)_i^2. \quad (3.17)$$

O resultado é o valor de 330,1.

Podemos encontrar a dispersão dos valores da idade σ , também conhecido como desvio padrão, através da equação:

$$\sigma = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (3.18)$$

Para o presente caso:

$$\sigma = \sqrt{\langle idade^2 \rangle - \langle idade \rangle^2} = \sqrt{330,1 - 18,1^2} \sim 1,578.$$

3.2.4 Números Aleatórios Segundo uma Distribuição

Podemos notar facilmente que a função cumulativa $f_{dc}(x)$ de $f_{dp}(x)$ entre x_0 e um valor qualquer de x no intervalo $[x_0; x_f]$ é dada por:

$$f_{dc}(x) = \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{x_0}^x f_{dp}(x') dx', \quad (3.19)$$

sendo $fdc(x)$ um número real no intervalo $[0; 1]$. Isto nos habilita, a princípio, a realizarmos a operação inversa, ou seja, a partir de um número real $R = fdc(x)$ no intervalo $[0; 1]$ podemos determinar através da inversão da equação (3.19) o valor correspondente de x . O lado prático desta inversão é que os valores de x obtidos desta forma seguem a mesma distribuição de $f(x)$.

Exemplo: Distribuição Uniforme Generalizada

Imaginemos que um caminhante aleatório siga uma distribuição uniforme entre $[-10; 10]$. Podemos, à partir de um gerador uniforme que gera números R independentes e aleatórios entre $[0; 1]$, gerar os números x desta distribuição se:

$$x = (R - 0,5) 20,0.$$

Exemplo: Distribuição Gaussiana

É bastante conhecido o fato de que podemos gerar números aleatórios segundo uma distribuição Gaussiana através do seguinte esquema, chamado de transformação de Box-Muller[5]. Se U_0 e U_1 são dois números aleatórios independentes gerados segundo uma distribuição uniforme no intervalo $[0; 1]$, podemos gerar dois números aleatórios Z_0 e Z_1 independentes gerados segundo uma distribuição Gaussiana segundo as expressões:

$$Z_0 = \sqrt{-2 \ln U_1} \cos(2\pi U_2),$$

e

$$Z_1 = \sqrt{-2 \ln U_1} \sin(2\pi U_2).$$

Exemplo: Distribuição Senoidal

Caso seja necessária a geração de números aleatórios segundo uma distribuição senoidal

$$f(x) = \sin(x),$$

no intervalo $[0, \pi]$ podemos utilizar o método descrito na seção anterior. Para isto calculamos primeiramente a normalização \mathcal{N} :

$$\mathcal{N} = \int_0^\pi \sin(x) dx = -\cos(x)|_0^\pi = 1 + 1 = 2,$$

Assim a função cumulativa é dada por:

$$fdc(x) = \frac{1}{2} \int_0^x \sin(x') dx' = -\cos(x) + \cos(0) = R.$$

Portanto, o número aleatório x gerado segundo a função distribuição $\sin(x)$ encontrado a partir do número aleatório R gerado através de uma distribuição uniforme é dado por:

$$x = \cos [1 - 2R]^{-1}.$$

Exemplo: Distribuição Triangular

Imagine que temos a seguinte função:

$$f(x) = \begin{cases} 2x, & 0 \leq x \leq 5 \\ 10 - 2(x - 5), & 5 \leq x \leq 10. \end{cases}$$

Podemos calcular facilmente a normalização $\mathcal{N} = 2 \times (5 \times 10 / 2) = 50$. Temos para a primeira parte de $f(x)$:

$$f dc(x) = R = \frac{1}{50} \int_0^x 2x' dx' = \frac{1}{50} \left(\frac{1}{2} 2x'^2 \right) \Big|_0^x = \frac{1}{50} x^2,$$

que resulta em:

$$x = \sqrt{50R} \quad 0 \leq R \leq 0,5.$$

A segunda parte pode ser escrita como:

$$f dc(x) = R = \frac{1}{50} \left[\int_0^5 2x' dx' + \int_5^x 10 - 2(x' - 5) dx' \right],$$

que é igual a:

$$f dc(x) = R = \frac{1}{50} \{ 25 + [20x' - x'^2]_5^x \}$$

que resulta em:

$$x^2 - 20x + (50R - 25 + 100 - 25) = 0,$$

cujas soluções são:

$$x = \frac{20 \pm \sqrt{400 - 200(R + 1)}}{2}$$

Assim as equações que definem como os valores de x podem ser sorteados é calculada como sendo:

$$x = \begin{cases} \sqrt{50R}, & 0 \leq R \leq 0,5 \\ \frac{1}{2} 20 - \sqrt{200(1 - R)}, & 0,5 \leq R \leq 1. \end{cases}$$

3.3 Resolução de Integrais por Monte Carlo

O método de Monte Carlo para a resolução numérica de integrais consiste em se realizar a seguinte substituição:

$$\int_{x_0}^{x_f} f(x') dx' \equiv I = (x_f - x_0) E[f(X)], \quad (3.20)$$

onde $E[f(x)]$ é o valor esperado da função $f(x)$ no intervalo de integração $[x_0, x_f]$. A determinação do valor esperado da função pode ser realizada de acordo com diferentes estratégias, descritas a seguir.

3.3.1 Método 1: Amostragem Uniforme

Este método é bastante intuitivo. Considere uma função $f(x)$ conhecida na qual se deseja calcular sua integral dentro do intervalo $[x_0; x_f]$. Considere agora que definimos dois valores de y : y_{min} e y_{max} menor e maior, respectivamente, do que os valor mínimo e máximo de $f(x)$ dentro do intervalo $[x_0; x_f]$. Desta maneira os valores de $x_0; x_f, y_{min}$ e y_{max} formam uma região retangular na qual $f(x)$ está contida. Considere agora que são gerados aleatoriamente N pontos dentro desta região retangular, cada ponto tendo coordenadas $\{x_i; y_i\}$. Para cada ponto gerado, verificamos se o mesmo se encontra na região entre $f(x)$ e o eixo das coordenadas de tal forma que dos N pontos gerados, um total de S se encontram nesta região. Se os pontos gerados foram sorteados de maneira que se possa considerar aleatória, é de se esperar que a integral de $f(x)$ na região analisada seja proporcional à S , na mesma medida em que a área da região retangular seja proporcional à N . Matematicamente:

$$\int_{x_0}^{x_f} f(x')dx' = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{S}{N} [(x_f - x_0)(y_{max} - y_{min})],$$

onde a quantidade entre colchetes é a área da região retangular.

3.3.2 Método 2: Amostragem Seletiva

Considerando ainda a integral I (eq. 3.20), o valor esperado de $f(x)$ pode ser inferido a partir do valor médio $\tilde{\mu}_N$ calculado como:

$$E[f(x)] \sim \tilde{\mu}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(X_i), \quad (3.21)$$

onde X_i são números aleatórios sorteados dentro do intervalo $[x_0, x_f]$. Calcula-se a integral por Monte Carlo através da expressão:

$$I = (x_f - x_0) \tilde{\mu}_N .$$

O problema com o método acima é ser limitado a intervalos de integração finitos e ser ineficiente ao varrer com números aleatórios regiões onde o integrando é pequeno e pouco contribui para o valor final da integral. Uma forma de otimizar o tempo de cálculo de I é sortearmos valores de $f(x)$ que estejam próximos ao valor médio da função no intervalo de integração. Para tanto utiliza-se uma distribuição $p(x)$ que, guardadas as proporções, mimetize o integrando.

Podemos transformar a integral I de uma função $f(x)$ da seguinte maneira:

$$I = \int_{x_0}^{x_f} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_f} \left[\frac{f(x)}{p(x)} \right] p(x)dx.$$

Imaginemos uma versão discretizada simples dessa integral e tomemos o intervalo de integração $[x_i, x_f]$ dividido em M partes de mesmo tamanho $\Delta x = \frac{x_f - x_i}{M}$,

$$I \sim \sum_{i=1}^M \frac{f(x_i)}{p(x_i)} p(x_i) \Delta x ; i = 1, M$$

O termo $p(x)\Delta x$ representa a probabilidade de que um número aleatório seja sorteado no intervalo $[x, x + \Delta(x)]$ ou, em se tratando de um gerador de números aleatórios, o número de vezes $h(x_i)$ que um número aleatório x_i é sorteado após N tentativas, ou seja,

$$p(x_i)\Delta x = h(x_i)/N .$$

A ideia central do método consiste em se trocar a soma ordenada \sum_1^M por uma soma sobre N valores aleatórios de X com distribuição $p(X)$,

$$I \sim \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(X_i)}{p(X_i)}$$

como o gerador vai naturalmente produzir $h(x_i)$ números aleatórios no intervalo $[x_i, x_i + \Delta x]$, ao se trocar a soma sobre M pela soma sobre N , restará apenas o fator $1/N$. Se $p(X)$ for escolhida simples o suficiente, é fácil utilizarmos algum método simples de amostragem, por exemplo o método da transformada inversa, a fim de sortearmos X . Esta tarefa pode ser impossível se $p(X)$ não for integrável.

Em resumo, uma boa candidata para função $p(x)$ deve ter as seguintes características:

- deve ter maior densidade ao redor da região onde o integrando de I é maior;
- $p(x) > 0$ para qualquer ponto do domínio a ser integrado;
- deve ser suficientemente simples para que uma distribuição aleatória possa ser facilmente calculada a partir dela.

Até este momento consideramos somente integrais unidimensionais, mas este método pode ser facilmente estendido para casos multi-dimensionais.

3.4 Caminhante Aleatório

O caminhante aleatório é um sistema onde um objeto pontual realiza passos aleatórios sucessivos que podem ter comprimento Δx fixo ou variável, em passos de tempo Δt que são, em geral, discretos. Este tipo de sistema visa simular tanto fenômenos físicos quanto outros observados em sistemas

que possuem características estocásticas. Entre os fenômenos físicos que podem ser simulados pelo caminhante aleatório, podemos citar o movimento de determinada molécula em um meio gasoso ou líquido. Neste caso, se soubéssemos a posição e velocidade de todas as moléculas que estão no meio em questão, além da forma precisa do potencial de interação das mesmas entre si, poderíamos caso tivéssemos o tempo e a capacidade computacional para tanto, calcular a trajetória de uma determinada molécula neste meio. Neste caso, o movimento desta molécula é caracterizado por momentos em que esta viaja com velocidade e direções constantes, quando está relativamente longe das demais moléculas a ponto de não sofrer influência do potencial das mesmas; estes momentos são intercalados com colisões com as demais moléculas onde tanto a velocidade quanto a direção provavelmente mudam devido à esta interação. Do ponto de vista de um observador externo, o comportamento desta molécula é de um caminhante que anda em linha reta por determinada distância, mudando abruptamente de direção repetidas vezes, de forma periódica mas aleatória. Outras áreas onde o estudo do caminhante aleatório pode ser aplicado são economia (flutuação dos preços de ações e de *commodities*), ecologia (movimento de cardumes de peixes e de aves quando em grupo) e física (movimento browniano), entre outros.

3.4.1 Modelo Discreto Unidimensional

Na presente publicação, estudaremos o caminhante aleatório mais simples: o caminhante aleatório unidimensional, com passo fixo $\Delta t = \pm l$, que tem igual probabilidade, de 50% ou 0.5, de dar um passo para a direção positiva do eixo x (o passo será, neste caso $+l$, e a nova posição $x_{n+1} = x_n + l$, onde x_n é a posição do caminhante no tempo t_n) quanto de dar um passo na direção negativa do eixo x (o passo será, neste caso $-l$, e a nova posição será $x_{n+1} = x_n - l$).

Em geral, o caminhante aleatório inicia seu movimento na origem do eixo x , ou seja, $x_0 = 0$. Assim, no primeiro passo ($t_1 = \Delta t$), segundo as regras acima, o caminhante pode pular tanto para a posição $x_1 = +l$ (caso o passo aleatório tenha sido dado no sentido positivo de x) quanto na posição $x_1 = -l$ (caso o passo aleatório tenha sido dado no sentido oposto). No passo seguinte as possíveis configurações do caminhante aleatório aumentam: caso ele tenha caminhado no sentido positivo de x no primeiro passo, ele pode dar mais um passo no sentido positivo ficando em $x_2 = 2l$ ou dar um passo no sentido oposto, ficando em $x_2 = 0$; outras possibilidades são relacionadas com a situação onde o primeiro passo do caminhante tenha sido no sentido negativo de x , já que neste caso ele pode ficar tanto em $x_2 = -2l$ caso o segundo passo também seja no mesmo sentido, ou ficar em $x_2 = 0$ caso o segundo passo seja no sentido oposto. Fica claro que depois

de dois passos os únicos lugares poderão estar ocupados são as posições $x_2 = -2l, 0, 0, +2l$. A posição $x_2 = 0$ está repetida na lista anterior porque dois caminhos diferentes resultam nesta mesma posição final: o caminhante dar um passo adiante e outro para trás ou o caminhante dar um passo inicial para trás e depois um passo para frente. Isto resulta no fato de que a probabilidade do caminhante retornar à posição original depois de dois passos é duas vezes maior do que ele dar dois passos adiante, por exemplo. Todos os passos seguintes seguem a mesma lógica.

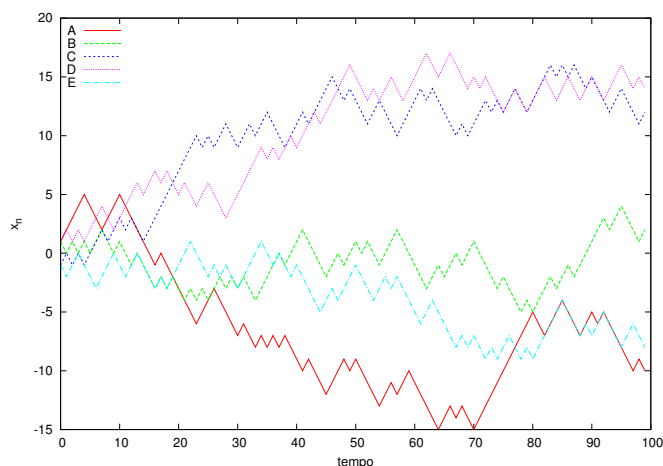


Figura 3.2: Exemplo de caminhos seguidos por 5 diferentes caminhantes aleatórios, inicialmente na origem e com igual probabilidade de darem um salto com $l = 1$ para frente ou para trás. Foram contabilizados os primeiros 100 passos para cada caminhante

Outro ponto de vista do caminhante aleatório é através do uso do conceito de *ensemble*, cuja definição é um conjunto virtual formado por, idealmente, um número infinitamente grande de indivíduos inicialmente idênticos que visitam todos os possíveis estados que este sistema pode assumir através de sua dinâmica intrínseca.

3.4.2 Modelo Generalizado

Suponha agora que o caminhante aleatório tenha passo contínuo, seguindo uma distribuição contínua $f(x)$, ou seja, cada passo do caminhante aleatório é escolhido de acordo com $f(x)$, e o tamanho do passo é determinado segundo a expressão (3.19).

Podemos fazer a análise, assim como no caso discreto, da posição média e desvio padrão calculado para um *ensemble* de caminhantes. Vamos estudar

o caso em que o passo é determinado segundo uma distribuição gaussiana na seção abaixo.

3.4.3 Caminhante Aleatório e o Teorema do Limite Central

Suponha um *ensemble* de N caminhantes aleatórios cuja dinâmica individual seja dada por uma série de passos aleatórios independentes que seguem uma distribuição $f(x)$ com média μ e variância σ^2 . O teorema do limite central diz que para valores grandes de N :

$$\sum_{t'=0}^t E[X(t')] \sim N\mu,$$

onde:

$$E[X(t)] = \frac{X_1(t) + X_2(t) + \dots + X_N(t)}{N},$$

e onde $X_i(t)$ é o caminho total percorrido por um caminhante aleatório no instante t . Além disso, o teorema também diz que os valores de X_i formarão uma distribuição normal (Gaussiana) ao redor de $N\mu$, com variância dada por $\sim N\sigma^2$.

3.4.4 Distribuições Sem Momento Definido

Considere o exemplo de um caminhante aleatório que dá passos segundo uma distribuição de Cauchy:

$$f(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}. \quad (3.22)$$

Podemos ver facilmente, conforme explicado na seção 3.2.4 que para gerar números aleatórios X que seguem esta distribuição, à partir de um gerador de valores R com distribuição uniforme, podemos usar a seguinte expressão:

$$X = \tan \left[\pi \left(R + \frac{1}{2} \right) \right].$$

Os gráficos resultantes mostram que apesar da média temporal da posição dos caminhantes permanecer próxima de zero, a largura da distribuição difere do que seria esperado para o caso de difusão normal. Isto pode ser explicado porque a distribuição (3.22) não possui segundo momento definido.

Atividades Sugeridas

1. Utilize o gerador aleatório congruente linear para calcular os primeiros 200 números pseudo-aleatórios gerados para os seguintes valores: a) $(x_0 = 27; a = 17; b = 43; m = 100)$ b) $(x_0 = 1, 2, 3, 4; a = 13; b = 0; m = 2^6)$. Para as sequências geradas verifique qual o período da mesma.
2. Faça um programa que simule a difusão de M caminhantes aleatórios em um espaço unidimensional. a) Faça histogramas da distribuição espacial de 10^5 caminhantes após 10000 passos quando esses se deslocarem respectivamente de 1, 2 e 3 unidades de distância a cada passo de tempo. b) Faça gráficos no gnuplot da distribuição espacial dos caminhantes. c) Ajuste o logaritmo dos histogramas encontrados a parábolas do tipo: $f(x) = b(x^2) + \log(a)$. d) Determine o desvio quadrático médio por passo em cada caso. e) Relacione o valor do parâmetro b ajustado com a distância percorrida por passo e com o tempo.
3. Use o método da transformada inversa para encontrar um gerador de números aleatórios cuja distribuição, $p(x)$, seja dada por $p(x) = \frac{A^2}{x^2+b^2}, x \in \{-\infty, \infty\}$. Encontre a relação entre b e A que normaliza a distribuição. Determine os dois primeiros cumulantes dessa distribuição.
4. Faça um programa que simule a difusão em uma dimensão de M caminhantes de passos contínuos. A probabilidade de um passo de tamanho x é dada por $p(x) = \frac{1}{2\lambda} e^{-|x|/\lambda}, x \in \{-\infty, \infty\}$. Faça um histograma de distribuição de caminhantes, use $\lambda = 2$.
5. Refaça o problema 4 usando o gerador encontrado no problema 3. Use $b = 5$.
6. Use o método de Monte Carlo para calcular $\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx$ onde $p(x)$ é definido na questão 3. Use $b = 5$ e a distribuição de números aleatórios é uma exponencial como definida na questão 4.
7. Mostre que o k -ésimo momento de uma distribuição uniforme definida em um intervalo L é dada por $\langle x^k \rangle = L^k / (k+1)$. Faça um programa que calcule numericamente o resultado obtido no item anterior.
8. Calcule $\int_0^3 x^{3/2} \exp(-x) dx$ através do método de Monte Carlo utilizando a função $p(x) = A \exp(-x)$ como função de amostragem.
9. Utilize a função $p(x) = A \exp(-ax)$ como função de amostragem para calcular a integral $\int_0^\pi (x^2 + \cos^2(x))^{-1} dx$. Determine o valor de a que minimiza a variância da integral.

Referências Bibliográficas

- [1] FACULDADE DE MATEMÁTICA - PUCRS. *Uma Introdução aos Métodos de Geração de Números e Variáveis Aleatórias para Aplicações em Simuladores*. Disponível em: http://www.pucrs.br/famat/viali/especializa/mia_ima_fafis/material/ead/outros/Geracao_de_numeros_e_variaveis_aleatorias.pdf. Acesso em: 25 de maio de 2015.
- [2] VIEIRA, CARLOS E. C.; RIBEIRO, CELSO C. de CASTRO e SOUZA, REINALDO. *Geradores de Números Aleatórios*. Disponível em: http://www.dbd.puc-rio.br/depto_informatica/04_22_vieira.pdf. Acesso em: 25 de maio de 2015.
- [3] SOUZA, CRISTÁN. *Números Aleatórios*. Disponível em: http://www.univasf.edu.br/~criston.souza/simulacao/arquivos/6-Numeros_aleatorios.pdf. Acesso em: 25 de maio de 2015.
- [4] PANG, TAO. *An Introduction to Computational Physics*, Cambridge University Press, New York, 1997.
- [5] WIKIPEDIA. *Box-Muller Transform*. Disponível em: https://en.wikipedia.org/wiki/Box%E2%80%93Muller_transform. Acesso em: 24 de junho de 2015.

APÊNDICE A

Desigualdades

Resolver desigualdades é muito parecido com resolver equações. A idéia é sempre isolar a variável (x neste capítulo) de um lado da desigualdade. Para que isto seja feito, uma ou mais operações matemáticas devem ser realizadas simultaneamente nos dois lados da desigualdade. A grande diferença é que o significado da desigualdade pode mudar frente a algumas operações específicas. As operações que podem ser realizadas sem mudança no sinal são:

- adição ou subtração nos dois lados;
- multiplicação ou divisão **por um número positivo** nos dois lados;
- simplificação em um dos lados.

Vejamos um exemplo:

$$\begin{array}{ll} 3x < 3 + 7 & (3 + 7 = 10) \\ 3x < 10 & (\div 3) \\ x < 10/3 & \end{array}$$

Entretanto, existem operações que invertem o sinal da desigualdade. Elas são:

- multiplicação ou divisão **por um número negativo** nos dois lados;
- trocar as equações de lado em relação ao sinal de desigualdade;
- quando pegamos o recíproco da desigualdade ($a > b \rightarrow 1/a < 1/b$).

Vejamos outro exemplo:

$$\begin{aligned} -8 &\geq -2y && (\div(-2)) \\ 4 &\leq y && (\text{troca de lado}) \\ y &\geq 4. \end{aligned}$$

Quando temos duas desigualdades aplicadas ao mesmo tempo, temos duas estratégias. Se o caso for simples, com a variável aparecendo em somente uma das partes, por exemplo, podemos aplicar as operações necessárias em todas as partes da desigualdade a fim de isolarmos a variável. Em casos mais complicados, teremos que separar as desigualdades em pares, resolvendo cada uma destes pares por vez. Vejamos um caso simples primeiro:

$$\begin{aligned} -2 < (6 - 2x)/3 < 4 && (\times 3) \\ -6 < 6 - 2x < 12 && (-6) \\ -12 < -2x < 6 && (\div(-2)) \\ 6 > x > -3 && (\text{troca de lado}) \\ -3 < x < 6. \end{aligned}$$

A.1 Desigualdades com valores absolutos

Quando temos valores absolutos envolvidos em desigualdades, temos que tomar alguns cuidados extras no processo de solução. Analisemos primeiramente o caso em que:

$$|x| > a,$$

com $a > 0$. As soluções da equação acima são:

$$x > a \text{ ou } x < -a.$$

Se $a < 0$, **qualquer** valor de x é solução da desigualdade, já que para qualquer valor de x , o valor absoluto deste número será positivo e, portanto, maior do que a .

Se a desigualdade for:

$$|x| < a,$$

com $a > 0$. As soluções da equação acima são:

$$x < a \text{ e } x > -a.$$

Se $a < 0$, **nenhum** valor de x é solução da desigualdade, já que para qualquer valor de x , o valor absoluto deste número será positivo e, portanto, maior do que a .

Vejamos alguns exemplos:

1. $|x - 20| > 5$:

- caso 1: $x - 20 > 5 \rightarrow x > 25$;
- caso 2: $x - 20 < -5 \rightarrow x < 15$;
- resposta: $x < 15$ **ou** $x > 25$.

2. $|x - 3| \leq 4$:

- caso 1: $x - 3 \leq 4 \rightarrow x \leq 7$;
- caso 2: $x - 3 \geq -4 \rightarrow x \geq -1$;
- resposta: $x \leq 7$ e $x \geq -1$ que é $-1 \leq x \leq 7$.

3. $|3 + x| - 4 < 0$:

- isolamos o módulo primeiro: $|3 + x| < 4$;
- caso 1: $3 + x < 4 \rightarrow x < 7$;
- caso 2: $x - 3 < -4 \rightarrow x < -1$;
- resposta: $x < 7$ e $x < -1$ que é $-1 < x < 7$.