Quadratura de Gauss-Legendre

A integral $\int_a^b f(x)dx$ pode ser colocada na forma $\int_{-1}^{1} f(z)\,dz$ por uma mudança de variável $z = \frac{2x-(a+b)}{b-a}$, $-1 \leq z \leq 1$

Sem perda de generalidade, vamos estudar as integrais tipo $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx$. Como anteriormente, vamos aproximar $f(x)$ por um polinômio interpolante e integrar como se segue

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \int_{-1}^{1} p_n(x) + \int_{-1}^{1} R_n(x)\,dx$$ onde aqui

$R_n(x)$ é o erro do polinômio interpolante.

Como os pontos x_i ainda não foram determinados podemos escrever o polinômio interpolante na forma de Lagrange

$$\begin{aligned} f(x) &= p_n(x) + R_n(x) \\ &= \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i) + \underbrace{\left[\prod_{i=0}^{n} (x-x_i)\right] \frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!}}_{\text{erro do polinômio interpolante}} \end{aligned}$$

$< x <$
$x \neq x_i$

onde $L_i(x) = \prod_{i=0}^{n} \left(\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\right)$

Se $f(x)$ for assumido um polinômio de grau $2n+1$ então o termo $\frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!}$ deve ser um polinômio de grau n.

$$q_n(x) \equiv \frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!} \qquad a < x < b$$
$$x \neq x_i$$

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x)\, f(x_i) + \left[\prod_{i=0}^{n} (x - x_i)\right] q_n(x)$$

integrando temos

$$\int_{-1}^{+1} f(x)\,dx = \int_{-1}^{+1} \sum_{i=0}^{n} L_i(x)\, f(x_i)\,dx + \int_{-1}^{+1} \left[\prod_{i=0}^{n} (x-x_i)\right] q_n(x)\,dx$$

$$= \sum_{i=0}^{n} \underbrace{\left[\int_{-1}^{+1} L_i(x)\,dx\right]}_{\equiv w_i} f(x_i) + \quad ''$$

$$= \sum_{i=0}^{n} w_i\, f(x_i) + \underbrace{\int_{-1}^{1} \left[\prod_{i=0}^{n} (x-x_i)\right] q_n(x)}_{\text{erro}}$$

onde $w_i = \int_{-1}^{1} L_i(x)\,dx = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\,dx$

O objetivo agora é selecionar x_i de forma que o termo do erro desapareça!

Vamos expandir $q_n(x)$ e $\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$ em termos dos polinômios de Legendre

$$\prod_{i=0}^{n}(x-x_i) = b_0 P_0(x) + b_1 P_1(x) + \dots + b_{n+1} P_{n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n+1} b_i P_i(x)$$

$$q_n(x) = c_0 P_0(x) + c_1 P_1(x) + \dots + c_n P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i P_i(x)$$

efetuando o produto e integrando

$$\int_{-1}^{+1} q_n(x) \prod_{i=0}^{n}(x-x_i) = \int_{-1}^{1}\left[\underbrace{\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n} b_i c_j P_i(x) P_j(x)}_{\substack{\text{todos os termos} \\ i \neq j \text{ deverão} \\ \text{desaparecer} \\ \text{devido à ortogonalidade}}} + \underbrace{b_{n+1} \sum_{i=0}^{n} c_i P_i(x) P_{n+1}(x)}_{\substack{\text{integral é zero} \\ \text{pois } i \neq n+1}}\right]$$

$$= \int_{-1}^{+1} \sum_{i=0}^{n} b_i c_i \left[P_i(x)\right]^2 dx$$

Uma maneira de fazer esta expressão ser zero é que todos os b_i, $i=0,1\dots n$ sejam zero. Mas para tanto olhando para expressão $\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$ em polinômios de Legendre devemos ter

$$\prod_{i=0}^{n}(x-x_i) = b_{n+1} P_{n+1}(x)$$ mas para que isto ocorra <u>x_i devem ser as raízes do polinômio $P_{n+1}(x)$.</u>

Raízes $P_{n+1}(x)$ e fatores peso (w_i)

	Raízes (x_i)	Fatores Peso (w_i)
2 pontos $n=1$	$\pm\sqrt{\frac{1}{3}}$	1
3 pontos $n=2$	0	$8/9$
	$\pm\sqrt{\frac{3}{5}}$	$5/9$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Existe uma rotina no Numerical Recipes (gauleg.c, gauleg.f) que calcula as raízes x_i e os pesos w_i para um dado n

Exemplo Calcule $\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$ usando quadratura de Gauss-Legendre com três pontos

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \int_0^2 \frac{\frac{1}{2}dx}{1+\left(\frac{x}{2}\right)^2} = \int_{-1}^1 \frac{\frac{1}{2}dx}{1+\left(\frac{x+1}{2}\right)^2} = \int_{-1}^1 \frac{2dx}{4+(x+1)^2}$$

$$\approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) \quad , \text{ onde } f(x) = \frac{2}{4+(x+1)^2}$$

$$\approx \frac{5}{9}\,\frac{2}{4+\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}+1\right)^2} + \frac{8}{9}\,\frac{2}{4+(0+1)^2} + \frac{5}{9}\,\frac{2}{4+\left(\sqrt{\frac{3}{5}}+1\right)^2}$$

$$= 0.274293789 + 0.35555555 + 0.155417689$$

$$\approx 0.785267033$$

erro = 0.00013

Valor correto = 0.785398163 $= \frac{\pi}{4}$

Generalizações outros tipos de Integral

De forma geral os polinômios ortogonais satisfazem as relações

$$\int_a^b W(x)\, g_n(x)\, g_m(x) = 0 \quad , \; n \neq m$$

$$\int_a^b W(x)\, [g_n(x)]^2 dx = C(n) \neq 0 \quad , \; W(x) \text{ é uma função peso}$$

Se $W(x) = 1$ temos polinômios de Legendre $P_n(x)$

$W(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ " " " Chebishev $T_n(x)$ $\begin{matrix} a=-1 \\ b=1 \end{matrix}$

$= e^{-x}$ " " " Laguerre $\mathcal{L}_n(x)$ $\begin{matrix} a=0 \\ b=\infty \end{matrix}$

$= e^{-x^2}$ " " " Hermite $H_n(x)$ $\begin{matrix} a=-\infty \\ b=+\infty \end{matrix}$

Integral tipo	x_i (raízes do polinômio de)	w_i
$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx$	Legendre, $P_n(x)$	$\int_{-1}^{1} L_i(x)\,dx$
$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)\,dx$	Chebishev, $T_n(x)$	$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} L_i(x)\,dx$
$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x)\,dx$	Laguerre, $\mathcal{L}_n(x)$	$\int_0^{\infty} e^{-x} L_i(x)\,dx$
$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x)\,dx$	Hermite, $H_n(x)$	$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} L_i(x)\,dx$

Exercício Calcule $\int_0^{\infty} e^{-x} \sin x\, dx$ usando 3 pontos com Quadratura de Gauss-Laguerre

(valor exato da Integral $= \frac{1}{2}$)

	raízes (x_i)	w_i
$n=2$, 3 pontos, Polin. de Laguerre	0.4157745567	0.7110930099
	2.2942803602	0.2785177335
	6.2899450829	0.01038925650

Solução

$$I = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) \qquad \text{onde } f(x) = \sin x$$

$$\begin{aligned}
&\simeq 0.7110930099 \times \sin(0.4157745567) &&= 0.29565438 \\
&+ 0.2785177335 \times \sin(2.2942803602) &&= 0.208750114 \\
&+ 0.01038925650 \times \sin(6.2899450829) &&= 0.000070228 \\
& && 0.50447472
\end{aligned}$$

que está em bom acordo c/ o valor exato $\frac{1}{2}$ usando apenas 3 pontos!

ERROS da Quadratura de Gauss -

Legendre $\quad E_n = \dfrac{2^{2n+3}\left[(n+1)!\right]^4}{(2n+3)\left[(2n+2)!\right]^3} f^{(2n+2)}(\xi) \qquad \xi$ em $(-1,1)$

Chebishev $\quad E_n = \dfrac{2\pi}{2^{2n+2}\,(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi) \qquad \xi$ em $(-1,1)$

Laguerre $\quad E_n = \dfrac{\left[(n+1)!\right]^2}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi) \qquad \xi$ em $(0,\infty)$

Hermite $\quad E_n = \dfrac{(n+1)!\,\sqrt{\pi}}{2^{2n+1}(2n+2)} f^{(2n+2)}(\xi) \qquad \xi$ em $(-\infty,+\infty)$

Integração por Monte-Carlo (M.C.)

Introdução: O que são métodos de Monte-Carlo?

Métodos de M.C. são aqueles que se utilizam de números aleatórios (ou pseudo-aleatórios) na sua composição. Eles tem larga aplicação em modelos físicos como por exemplo na mecânica Estatística e simulações de sistemas de muitos corpos. "Many Body"

Uma lista de aplicações é a seguinte:

- Modelo de Ising - algoritmo de Metropolis
- "Salesman Problem"
- Random Walk
- DMC - Diffusion M.C. Method
  Cálculo do estado fundamental de sistemas de muitos corpos
- QDMC → Quantum Determinant M.C. - Modelo de Hubbard
- PIMC - Path Integral M.C.
- Física de Reações (Colisões)
- Integrais Multidimensionais $\int dx\, dy\, dz\, dp_x\, dp_y\, dp_z\, f(x,y,z,p_x,p_y,p_z)$

Nesse curso introdutório vamos apenas considerar a aplicação de números aleatórios para o cálculo da integral de uma função:

Geração de números aleatórios

"Random Number Generators" (RNG)

A geração de números aleatórios é uma arte por si só. Atualmente é possível adquirir geradores de números realmente aleatórios "true random number generators" que digitalizam o ruído gerado em uma junção semi-condutora ao ser atravessado por uma corrente. Entretanto a taxa de geração é limitada. Em geral usam se operações aritméticas para geração de números aleatórios (ou pseudo aleatórios)

Um dos algoritmos aritméticos mais conhecidos é o devido à Lehmer (1951) e chamado de "Linear Congruential Generator" (LCG). Ele é expresso na forma

48?

$$Z_{i+1} = (a Z_i + b) \bmod m = \text{resto da divisão } \frac{a Z_i + b}{m}$$

$m \rightarrow$ modulus

$0 \leq a < m \rightarrow$ "multiplier"

$0 < b < m$ "increment"

$0 \leq Z_0 < m$ é a semente ("seed") ou valor inicial ("start value")

Se a, b, m são propriamente escolhidos então o período será máximo. Nesse caso todos os inteiros entre 0 e $m-1$ ocorrerão em algum ponto de forma que a semente inicial Z_0 é tão boa como qualquer outra.

Seja $a=4$, $b=1$, $m=9$, $z_0=3$

$$Z_{i+1} = (4 Z_i + 1) \bmod 9$$

$z_0 = 3$

$z_1 = (4 \times 3 + 1) \bmod 9 = 13 \bmod 9 = \text{resto } \frac{13}{9} = 4$

$z_2 = (4 \times 4 + 1) \bmod 9 = 17 \bmod 9 = \text{resto } \frac{17}{9} = 8$

$z_3 = (4 \times 8 + 1) \bmod 9 = 33 \bmod 9 = \text{resto } \frac{33}{9} = 6$

$\vdots$

7, 2, 0, 1, 5, 3 ← ciclo de tamanho m

- Para termos uma longa sequência m deve ser um nº grande mas não tão grande que a*m cause overflow.

- Se obtivermos m nºs aleatórios entre 0 e m-1 podemos obter uma distribuição uniforme entre [0, 1) pela divisão

$$U_{i+1} = Z_{i+1} / m \quad \text{(resultado real)}$$

U_{i+1} ↓ valor entre [0, 1)

Z_{i+1} ↓ valor entre 0 e m-1

Park & Miller LCG $(b=0)$ (EP3)

$a = 7^5 = 16807$

$b = 0$ $\qquad Z_0 \neq 0$

$m = 2^{31} - 1 = 2147483647$, ciclo $2^{31} - 2$

PROGRAMA PRINCIPAL

idum = nº USP (Z_0 escolhido aleatoriamente $\neq 0$)

x = random (idum) $\qquad$ x recebe nº aleatório (0, 1)

⋮

FIM DO PROGRAMA

FUNÇÃO RANDOM (idum)

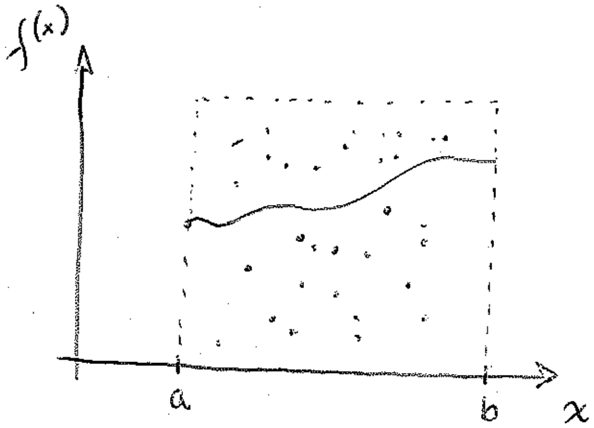
$a = 16807$

$m = 2147483647$

idum = a * idum mod m

retorna $\frac{idum}{m}$ (nº real)

Integração por Monte-Carlo Simples "Simple Monte Carlo Integration"

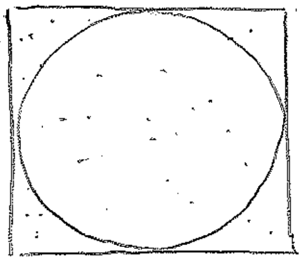


Suponha que desejamos saber a área sob a curva que liga a e b. Jogamos então aleatoriamente pontos no retângulo que contém a área de integração. Dividindo o número de pontos sob a curva pelo total de pontos jogados e multiplicando pela área do retângulo teremos uma aproximação da área (ou $\int_a^b f(x)dx$) sob a curva.

$$\int_a^b f(x)\,dx = \text{Área sob a curva} \simeq A \, \frac{\text{nº de pontos sob a curva}}{\text{nº total de pontos}}$$

A é área do retângulo

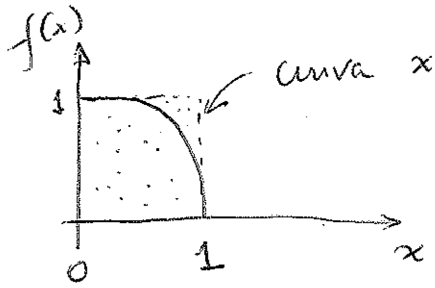
Ex: Cálculo da área de um círculo



$$\longrightarrow \quad \text{área do círculo} = A \, \frac{\text{nº de pontos dentro do círculo}}{\text{nº total de pontos jogados}}$$

A é a área do quadrado circunscrito.

Considerando apenas o 1º quadrante:



curva $x^2+y^2=1$, ou $y=\sqrt{1-x^2}$

$$\int_0^1 f(x)\,dx = \int_0^1 \sqrt{1-x^2}\,dx = \frac{1}{4}\text{ área do círculo} = \frac{\pi}{4}$$

$$\approx \frac{\text{nº de pontos sob a curva (dentro)}}{\text{nº de pontos total}}$$

Usando um "Linear Congruential generator" na forma $z_{i+1} = a z_i \bmod m$, $a = 16807$, $m = 2^{31}-1$ obtivemos a seguinte tabela para 10 pontos $(z_0=1)$

x	y	x^2+y^2	
7.8263693×10^{-6}	0.1315378	1.7302191×10^{-2}	
0.7556053	0.4586501	0.7812994	
0.5327672	0.2189592	0.3317840	
4.7044616×10^{-2}	0.6788647	0.4630705	
0.6792964	0.9346929	1.335094	→ fora
0.3835021	0.5194164	0.4168672	
0.8309653	3.457211×10^{-2}	0.6916987	
5.3461634×10^{-2}	0.5297002	0.2834404	
0.6711494	7.6981862×10^{-3}	0.4505008	
0.3834156	6.6842236×10^{-3}	0.1514754	

$$\pi \approx 4\,\frac{\text{nº pontos dentro}}{\text{nº total de pontos}} = \frac{4\cdot 9}{10} \approx 3.6$$

resultado grosseiro (poucos pontos)

pontos	π
10	$\frac{4\cdot9}{10}\approx 3.6$
20	$\frac{4\cdot17}{20}\approx 3.2$
⋮	
100	$\frac{4\cdot71}{100}\approx 2.8$
⋮	
1000	$\frac{4\cdot792}{1000}\approx 3.16$

Integrais Multidimensionais

Suponha que possamos calcular razoavelmente uma integral em 1D com método de Simpson usando ~30 pontos. Se tivermos de fazer uma integral 3D precisaríamos $N_{TOT} = N^3$ calculos da função ≈ 30.000 pontos em 3D. Ou seja $N_{TOT} = N^d$

Para o mesmo N_{TOTAL} de pontos

$$\text{Simpson} - \text{erro } \mathcal{O}(h^4) \propto \frac{1}{N^4}$$

$$\text{Monte Carlo} - \text{erro } \sigma_m \propto \frac{1}{\sqrt{N_{TOT}}} = \frac{1}{N_{TOTAL}^{1/2}} = \frac{1}{(N^d)^{1/2}}$$

$$\text{erro monte Carlo} \leq \text{erro Simpson}$$

$$d\,\frac{1}{2} \geq 4 \longrightarrow d \geq 8$$

— Para integração multidimensional o método de Integração por M.C. simples pode ser mais eficiente desde que $d > 8$

— Existem melhoras no M.C. que permitem fazer com que o erro seja $< \frac{1}{N^{1/2}}$. Ver Num. Recipes

CAP. VII Equações Diferenciais Ordinárias (E.D.O.)

– Apresentam derivadas apenas em relação a uma variável

Exemplos:

i) $m\dfrac{d^2x}{dt^2} = mg$

cuja solução é $x = x_0 + v_0 t + \dfrac{gt^2}{2}$

ii) $m\dfrac{d^2x}{dt^2} + kx = 0$ cuja solução é $x = x_0 \cos(\omega_0 t + \varphi_0)$, $\omega_0 = \sqrt{\dfrac{k}{m}}$

sistema massa-mola

iii) $m\dfrac{d^2x}{dt^2} + b\dfrac{dx}{dt} + kx = 0$ sistema massa-mola com amortecimento

cuja solução é $x = x_0\, e^{-\gamma t} \cos(\omega t + \varphi_0)$ caso (subcrítico) $\gamma = \dfrac{b}{2m}$

iv) $\dfrac{dN}{dt} = -kN$ → decaimento radioativo

cuja solução é $N = N_0 e^{-kt}$

Se a equação envolve apenas derivadas de 1ª ordem é chamada de E.D.O. de 1ª ordem. Qualquer equação que satisfaça uma E.D.O. é chamada de solução.

Vamos examinar somente as eq. ordinárias que podem ser colocadas na forma explícita[+]

$$y' = f(t, y) \quad , \quad \text{onde} \quad y' = \frac{dy}{dt}$$

A solução envolverá uma constante arbitrária que pode ser determinada se a solução satisfizer um vínculo adicional. A determinação de $y' = f(t, y)$ p/ $t \geq t_0$ sujeito a $y(t_0) = y_0$ é chamada de problema de valor inicial ("initial value problem"). A condição $y(t_0) = y_0$ é chamada de valor inicial ("initial value")

A base para várias técnicas simples para resolver a equação diferencial

$$y' = f(t, y) \quad , \quad y(t_0) = y_0 \quad , \quad t_0 \leq t \leq t_f$$

é expressar a solução em $t+h$, i.e., $y(t+h)$ em termos de $y(t)$. Assim, começando com valor inicial $y(t_0) = y_0$, uma solução aproximada pode ser gerada nos pontos $t = t_0 + h$, $t_0 + 2h \ldots$

[+] Os matemáticos preferem em geral usar a variável x em vez da variável t. Usaremos t pois várias E.D.O. físicas são dependentes do tempo.

Método de Euler

$$y' = f(t,y) \quad \text{ou}$$

$\dfrac{dy}{dt} = f(t,y)$, a derivada pode ser aproximada como

$\dfrac{y(t+\Delta t) - y(t)}{\Delta t} \approx f(t,y)$, ou

$$y(t+\Delta t) \approx y(t) + \Delta t\, f(t,y)$$

chamando Δt de h temos $y(t+h) \approx y(t) + h\, f(t,y)$

Esse resultado pode também ser obtido da expansão em série de Taylor

$y(t+h) = y(t) + h\,y'(t) + T(h)$, onde $T(h) = \dfrac{h^2}{2} y''(\xi)$

$t < \xi < t+h$ e é frequentemente chamado de erro de Truncamento local. Se h é suficientemente pequeno podemos aproximar $y(t+h)$ pelos dois primeiros termos

$$y(t+h) = y(t) + h\, f(t, y(t))$$

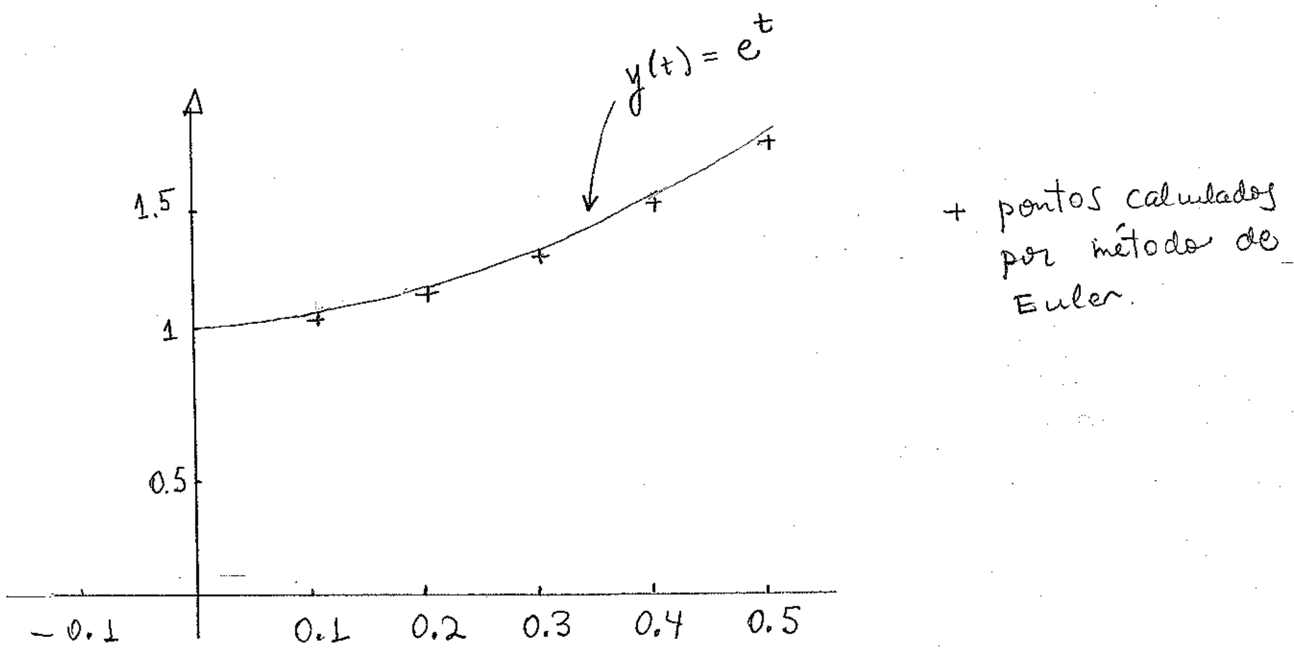
Assim se $y(t_0)$ é conhecido e um tamanho de passo h é fornecido podemos estimar $y(t_0+h)$. Este procedimento é repetido para obter $y(t_0+2h)$ de $y(t_0+h)$ e assim por diante.

Exemplo: Encontre a solução aproximada de $y' = y$, $y(0) = 1$

Solução Tomando passo $h = 0.1$ temos, $f(t, y) = y$,

$$y(0.1) \approx y(0) + 0.1\, f(0, y(0)) = y(0) + 0.1\, y(0) \approx 1.1$$
$$y(0.2) \approx y(0.1) + 0.1\, f(0.1, y(0.1)) \approx 1.1 + 0.1 \times 1.1 \approx 1.21$$
$$y(0.3) \approx y(0.2) + 0.1\, f(0.2, y(0.2)) \approx 1.21 + 0.1 \times 1.21 = 1.331$$
$$y(0.4) \approx y(0.3) + 0.1\, f(0.3, y(0.3)) \approx 1.4641$$
$$y(0.5) \approx y(0.4) + 0.1\, f(0.4, y(0.4)) \approx 1.61051$$

estes valores podem ser comparados com a solução verdadeira $y(t) = e^t$ nos pontos $t = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ e 0.5.



O método utilizado aqui pode ser expresso na forma

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + h f(t_i, y_i)} \quad , \quad y_0 = y(t_0)$$
$$t_i = t_0 + ih$$

Exercícios Use o método de Euler para encontrar soluções aproximadas para

(i) $y' = ty^2$
(ii) $y' = \sqrt{t}\,\sin y$

sujeitas a $y(0) = 1$ e cada caso tomando $h = 0.1$, 0.05 e 0.025. Compare as aproximações p/ $y(1)$ em cada caso.

Vimos que, num certo ponto, a discrepância entre a solução produzida e a solução da equação diferencial é determinada pelo erro de truncamento local. Devemos considerar como estes erros influenciam valores posteriores. Vamos assumir que uma solução aproximada foi obtida em $t = t_0 + ih$. A diferença entre $y(t)$ e a aproximação discreta y_i é chamada de "erro de discretização global" ("Global Discretization Error")

Quando $h \to 0$ mais e mais passos são necessários para alcançar um determinado t, i.e., $i \to \infty$. Uma condição suficiente para a equação de diferenças convergir para a solução da equação diferencial é que o erro global tenda a zero quando $h \to 0$, $i \to \infty$, $t_i = t_0 + ih$.

Método do Trapézio

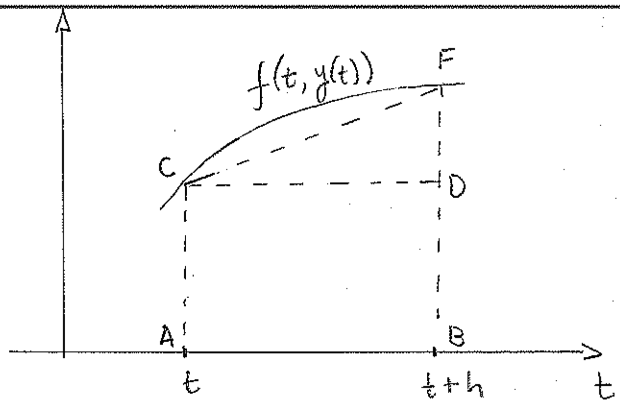
$$y' = f(t,y)$$

$$\frac{dy}{dt} = f(t,y)$$

$$dy = f(t,y)\,dt$$

integrando ambos os lados de t até $t+h$

$$y(t+h) - y(t) = \int_t^{t+h} f(t,y(t))\,dt$$



$$\int_t^{t+h} f(t,y(t))\,dt \approx \text{área do retângulo } ABCD \Rightarrow \text{método de Euler}$$

Usando uma aproximação melhor como a área do trapézio ABFC produz

$$\int_t^{t+h} f(t,y(t))\,dt = \frac{h}{2}\left[f(t,y(t)) + f(t+h, y(t+h))\right] + T(h)$$

onde $T(h) = \frac{h^3}{12}\frac{d^3y}{dt^3}(\xi) \quad t < \xi < t+h$

Para h suficientemente pequeno substituimos $y(t)$ por y_i em $t = t_i$ e obtemos o método

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left[f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1})\right]$$

que é o método do trapézio.

É um método mais acurado que o método de Euler mas tem a desvantagem de ser <u>implícito</u>, i.e., a cada passo uma equação não linear tem de ser resolvida.

<u>Exemplo</u>: Encontre a solução aproximada para

$$y' = ty^2 \quad , \quad y(0) = 1 \quad \text{usando o método do trapézio}$$

<u>Solução</u> $f(t,y) = ty^2$

Usando $h = 0.1$

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{2}\left[f(t_0, y_0) + f(t_1, y_1)\right]$$

$$y_1 = y_0 + \frac{0.1}{2}\left[f(0, y_0) + f(0.1, y_1)\right]$$

$$= 1 + 0.05\left[0 + 0.1 y_1^2\right]$$

$$0.005\, y_1^2 - y_1 + 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad y_1 \begin{cases} 198.99494 & \times \text{ não serve} \\ 1.005 \end{cases}$$

em geral essas equações algébricas são resolvidas por métodos iterativos como

$$y_1^{(k+1)} = y_0 + 0.05\left[f(t_0, y_0) + f(t_1, y_1^{(k)})\right]$$

com $y_1^{(0)} = y_0$, que converge linearmente para y_1 desde que $\left|\frac{h}{2}\frac{\partial f}{\partial y}\right| < 1$

Método de Runge-Kutta (RK)

Vimos que o método do trapézio era dado por

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left[f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1})\right] ,$$

mas poderíamos aproximar y_{i+1} do lado direito pelo método de Euler, fornecendo explicitamente

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left[f(t_i, y_i) + f\left(t_i + h,\ y_i + h f(t_i + h)\right)\right]$$

que é chamado de "Simple Runge-Kutta Method" ou "Improved Tangent Method".

Podemos generaliza essa idéia introduzindo mais parâmetros de forma a minimizar o erro expressando

$$y_{i+1} = y_i + \left[\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2 + \dots + \alpha_p k_p\right]$$

onde $k_1 = h f(t_i, y_i)$, $k_m = h f(t_i + \nu_m h ,\ y_i + \mu_m k_{m-1})$, $m = 2, 3 \dots p$

Isto fornece p α's , $p-1$ ν's e $p-1$ μ's totalizando $3p-2$ parâmetros a serem determinados.

$p = 1 \longrightarrow$ fornece $y_{i+1} = y_i + \alpha_1 k_1$ e $k_1 = h\, f(t_i, y_i)$ ou

$$y_{i+1} = y_i + h \alpha_1 f(t_i, y_i)$$

para o qual $\alpha_1 = 1$ se reduz ao método de Euler.

$p = 2 \longrightarrow$ $y_{i+1} = y_i + \left[\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2\right]$

$$k_1 = h f(t_i, y_i) \quad , \quad k_2 = h f\left(t_i + \nu_2 h ,\ y_i + \mu_2 k_1\right)$$

Para encontrar valores α_1, α_2, ν_2 e μ_2 lembramos que y_i é uma aproximação de $y(t_i)$ e consideramos

$$y(t+h) = y(t) + h\alpha_1 f(t, y(t)) + h\alpha_2 f(t+\nu_2 h, y(t)+\mu_2 f(t, y(t))) + T$$

Expandindo $f(t+\nu_2 h, y(t)+\mu_2 h f(t,y(t)))$ em série de Taylor fornece

$$y(t+h) = y(t) + \alpha_1 h f(t, y(t)) + \alpha_2 h \left[f(t,y(t)) + \nu_2 h f_t + \mu_2 h f \frac{\partial f}{\partial y} \right] + O(h^3)$$

Que pode ser comparada com a expansão de Taylor

$$y(t+h) = y(t) + h y'(t) + \frac{h^2}{2} y''(t) + O(h^3) .$$

Mas $y' = f(t, y(t))$

$$\Rightarrow y'' = \frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial y}{\partial t}\frac{\partial f}{\partial y} = f_t + f f_y$$ onde usamos a regra da cadeia

Substituindo temos

$$y(t+h) = y(t) + hf + \frac{h^2}{2}(f_t + f f_y) + O(h^3)$$

A comparação fornece

$$\left.\begin{aligned} \alpha_1 + \alpha_2 &= 1 \\ \alpha_2 \nu_2 &= \frac{1}{2} \\ \alpha_2 \mu_2 &= \frac{1}{2} \end{aligned}\right\}$$ 3 equações
4 incógnitas
$\Rightarrow$ solução não é única

Por exemplo $\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{2}$, $\nu_2 = \mu_2 = 1$ fornece

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left[f(t_i, y_i) + f(t_i + h, y_i + h f(t_i, y_i)) \right]$$

que é o RK simples já visto. ERRO local $O(h^3) \rightarrow$ Método 2ª ordem.
Note que se a função não depende de y se reduz ao método de integração por trapézios.

A escolha $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = 1$, $\nu_2 = \mu_2 = \frac{1}{2}$ fornece

$$y_{i+1} = y_i + h\, f\left(t_i + \frac{h}{2},\, y_i + \frac{h}{2} f(t_i, y_i)\right)$$

que é chamado de Método de Euler-Cauchy. Se não depende de y se reduz ao método do ponto médio visto na integração.

Aumentando o nº de parâmetros (p) é possível construir métodos de ordem superior mas à medida que p aumenta a derivação é semelhante mas é tediosa. Tomando $p=4$ teremos 10 equações e 12 incógnitas e dois parâmetros devem ser selecionados arbitrariamente.

Por exemplo o método de R.K. Clássico ("Classical Runge-Kutta Method") é

$$k_1 = h\, f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = h\, f\left(t_i + \frac{h}{2},\, y_i + \frac{k_1}{2}\right)$$

$$k_3 = h\, f\left(t_i + \frac{h}{2},\, y_i + \frac{k_2}{2}\right)$$

$$k_4 = h\, f(t_i + h,\, y_i + k_3)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}\left[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right]$$

erro local $O(h^5)$

" global $O(h^4)$ $\rightarrow$ método de 4ª ordem

Note que se f não depende de y então o método de RK Clássico se reduz à regra de Simpson para integração entre t e $t+h$, usando os pontos t, $t+\frac{h}{2}$, $t+h$.