

Relatórios de Métodos Computacionais B

Pedro Henrique Mendes

2020

Introdução

Métodos Computacionais B foi, de longe, a melhor cadeira que fiz na primeira metade do curso. O aprofundamento em cálculo numérico e uma introdução a simulações me fez perceber que eu quero seguir na física computacional. O curso ministrado de forma excelente pelo professor Leonardo Brunnet – em 2019/2 – se divide em três áreas.

A primeira área, resolução de EDO's, dá uma ideia geral de algoritmos de cálculo numérico. Expandir em série de Taylor e achar uma equação de recorrência é utilizado com frequência em quase todos os métodos, fazendo pensar que uma ordem a mais não influenciará. A segunda, Mapas, nos introduz a simulação. O famoso mapa logístico, primeiro assunto abordado, traz consigo uma coisa nova, o caos. Nessa área também vemos os Automatas Celulares, que são fortemente utilizados até hoje por sua simplicidade. A última área é a que mais me atrai, números aleatórios e introdução ao método de Monte Carlo. Aqui aprendemos como fazer RNGs simples, para que não seja mais necessário utilizar o `rand()`, e mais complexos, seguindo alguma distribuição. O método de Monte Carlo, que possui um interesse maior na Métodos Computacionais C, é introduzido utilizando o exemplo mais simples: o cálculo do π .

É interessante notar que quase toda cadeira pode ser resumida em algumas bibliotecas de Python ou C. Entretanto a ideia aqui é justamente essa, aprender as ideias que os métodos trazem consigo para que depois possam ser utilizados de forma certa no futuro. Deixo aqui então todos relatórios realizados ao longo do semestre 2019/2. Os programas utilizados para a realização dos relatórios estão disponíveis para acesso aberto ¹. A apostila que o curso segue também esta disponível ². Notem que são trabalhos de aula, logo esse compilado tem um intuito de que todos os trabalhos possam ser encontrados juntos. Não realizei nenhuma mudança de conteúdo enquanto realizava a compilação, assim, erros podem ser encontrados.

¹<https://lief.if.ufrgs.br/~pedhmendes/cadeiras/metcomp/metcomp.html>

²http://pcleon.if.ufrgs.br/~leon/metcomp/notas_de_aula.pdf

Sumário

1	Área 1 - Equações Diferenciais Ordinárias	3
1.1	Método de Euler Explícito	4
1.2	Método de Euler Implícito	5
1.3	Euler Explícito e Euler-Cromer	8
1.4	Euler-Cromer para Ângulos Grandes	10
1.5	Método de Verlet e Velocity-Verlet	13
1.6	Runge-Kutta-2 e Runge-Kutta-4	16
1.7	Erro em Resoluções de EDOs	19
1.8	Integração por Passos Variáveis	22
1.9	Integração por Multipassos	24
2	Área 2 - Mapas	26
2.1	Mapa de Bifurcações e Coeficiente de Lyapunov	27
2.2	Cellular Automata e Jogo da Vida	29
2.3	Matriz de Recorrência para o Mapa Logístico	31
3	Área 3 - Números Aleatórios	33
3.1	Números Aleatórios	34
3.2	Números Aleatórios - Schrage	35
3.3	Caminhante Aleatório - Distribuição Contínua	38
3.4	Diversos Caminhantes Aleatórios	40

Capítulo 1

Área 1 - Equações Diferenciais Ordinárias

1.1 Método de Euler Explícito

O Método de Euler Explícito foi aplicado ao problema de decaimento radioativo. Sabemos que a taxa de decaimento varia diretamente com o número de átomos presentes, então podemos montar a seguinte relação:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{x}{\tau}$$

Assim podemos fazer uma expansão de Taylor, e *truncar* no segundo termo. A função que obtida foi:

$$X_n = x_{n-1} - \frac{x_{n-1}}{\tau} \Delta t$$

Foi tomado $\tau = 2$ e o valor inicial (x_0) como 10. Assim foram realizadas diferentes gráficos, para diferentes Δt . Na Tabela 1 se encontram os valores de Δt e seus gráficos associados na Figura 1.

Δt	Gráfico
0,1	data1.dat
0,5	data2.dat
1,0	data3.dat
2,0	data4.dat
2,5	data5.dat

Tabela 1.1: Δt e seus respectivos gráficos

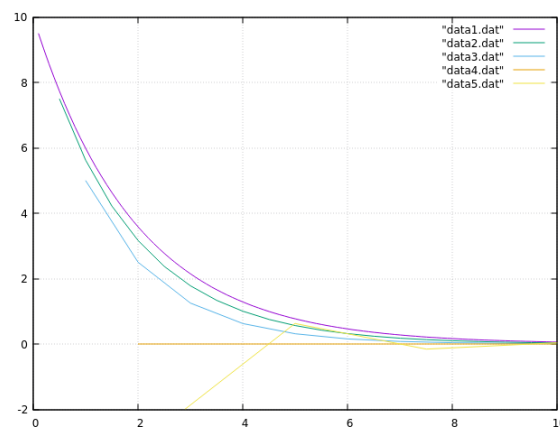


Figura 1.1: Gráfico das funções obtidas

Podemos ver que, para Δt menores que τ o gráfico se assemelha muito a uma exponencial. Tal resultado faz sentido, uma vez que a solução analítica do problema é uma exponencial da forma.

$$X = X_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Poderíamos nos aproximar cada vez mais da função se fizemos Δt cada vez menor. É interessante notar que, para um valor de Δt maior que τ não conseguimos aproximar essa integral. O valor passa rapidamente para baixo de zero e sabemos que isso não acontece nas exponenciais.

1.2 Método de Euler Implícito

O Método de Euler foi aplicado ao problema de decaimento radioativo. Sabemos que a taxa de decaimento varia diretamente com o número de átomos presentes, então podemos montar a seguinte relação:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{x}{\tau}$$

No Método de Euler Explícito fazemos uma expansão de Taylor, e *truncamos* no segundo termo. Assim obtendo:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{x_i}{\tau} \Delta t \quad (1.1)$$

Explicitando o termo x_i :

$$x_{i+1} = x_i \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau} \right) \quad (1.2)$$

O Método Explícito apresenta uma limitação, ele vale apenas no intervalo que

$$\left| 1 - \frac{\Delta t}{\tau} \right| < 1 \quad (1.3)$$

Como sabemos o valor de τ podemos eliminar o módulo e achar limites superior e inferior do método.

$$-1 < \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau} \right) < 1 \quad (1.4)$$

Então, simplificando os limites

$$0 < \frac{\Delta t}{\tau} \quad (1.5)$$

$$\frac{\Delta t}{\tau} < 2 \quad (1.6)$$

É possível ver que para o Método de Euler Explícito nós obtemos um intervalo limite que Δt pode estar. Ou seja, não podemos obter um passo igual ou menor que zero (5), nem igual ou maior que quatro (6). Esses valores tem são específicos para este caso, pois tomamos $\tau = 2$.

Para o Método de Euler Implícito partimos da definição formal de limite

$$\frac{x_{i+\Delta t} - x_i}{\Delta t} = -\frac{x_i}{\tau} \quad (1.7)$$

Queremos isolar x_i , então vamos fazer umas simplificações algébricas.

$$x_{i+\Delta t} - x_i = -\frac{x_i}{\tau} \Delta t \quad (1.8)$$

$$x_i \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau} \right) = x_{i+\Delta t} \quad (1.9)$$

Por fim chegamos a um resultado utilizaremos

$$x_i = \frac{x_{i+\Delta t}}{1 + \Delta t/\tau} \quad (1.10)$$

Vemos nesse caso que Δt pode assumir qualquer valor positivo que o método continuará a funcionar. Assim, foram obtidas curvas correspondentes a diversos valores de Δt . Os valores que correspondem a cada gráfico, tal qual o analítico, se encontram na Tabela 1. Os gráficos se encontram na Figura 1.

Δt	Gráfico
0,1	data1.dat
0,5	data2.dat
2,0	data3.dat
4,0	data4.dat
Analítico	$10*\exp(-(x/2))$

Tabela 1.2: Δt e seus respectivos gráficos

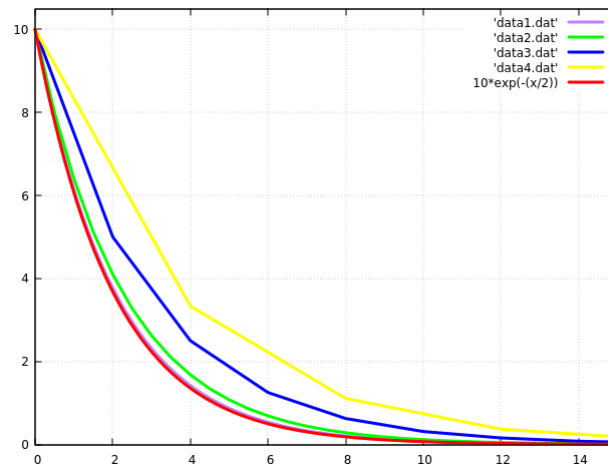


Figura 1.2: Gráficos obtidos para diferentes Δt , usando o Método de Euler Implícito.

Vemos que ao aumentar o tamanho de Δt , a função continua tendendo a zero com uma característica exponencial. Na Figura 2 foram realizados gráficos dos Métodos de Euler Explícitos e Implícitos para um Δt igual a 0,1.

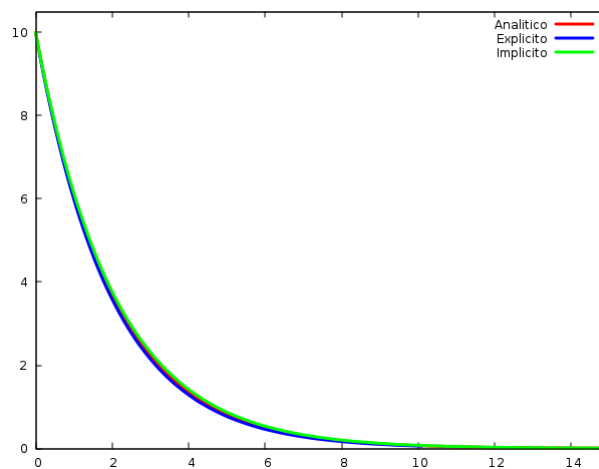


Figura 1.3: Gráfico de comparação entre os métodos

O Gráfico do resultado Analítico fica muito escondido atrás de ambos resultados numéricos. Podemos notar que o resultado Explícito passa abaixo do valor Analítico, enquanto o Implícito passa acima. Isso acontece pois o Método Implícito olha para os valores a frente, somando termos, enquanto o Explícito olha para atrás, subtraindo. Entretanto, para valores muito pequenos de Δt ,

como o escolhido para os Gráficos da Figura 2, os valores se aproximam mais e mais do valor Analítico. Entretanto, como já discutido, o Método Explícito pode ser usado com qualquer valor de Δt , enquanto o Implícito depende do valor de τ .

1.3 Euler Explícito e Euler-Cromer

O Pêndulo Simples

Sabemos da mecânica newtoniana que

$$m\ddot{\theta} = -m g \sin(\theta) \quad (1.11)$$

E como iremos tratar em uma região de pequenos ângulos, menores que 15° , podemos fazer a seguinte aproximação

$$\sin(\theta) \approx \theta$$

Então o problema se resume em

$$\ddot{\theta} = -g \theta \quad (1.12)$$

Lembrando que essa aproximação é válida apenas quando o ângulo é menor ou igual a 15° . O resultado analítico é conhecido, o que auxilia quando fizermos os gráficos, e é

$$\theta(t) = \theta_0 \cos(\omega t + \phi) \quad (1.13)$$

Então para acharmos um resultado numérico iremos usar dois métodos, Euler Explícito e Euler-Cromer, e decidiremos qual deles é mais adequado para o caso.

Euler Explícito

O Método de Euler Explícito tem como base a Expansão de Taylor *truncada* no segundo termo. É importante notar que estamos tratando de uma Equação Diferencial de Segunda Ordem, e não podemos aplicar o método diretamente. Primeiro é preciso fazer uma mudança de variável da forma

$$\dot{x} = v \quad (1.14)$$

Agora podemos aplicar o método, e obtemos

$$\theta_{i+1} = \theta_i (v_i \Delta t) \quad (1.15)$$

$$v_{i+1} = v_i - \omega^2 \sin(\omega \theta_{i+1} \Delta t) \quad (1.16)$$

Euler-Cromer

O Método de Euler-Cromer é uma adaptação do Método de Euler. A base é a mesma, e também usamos a mudança de variável necessária no Euler Explícito, entretanto agora quando estivermos resolvendo as equações para θ_{i+1} usaremos v_{i+1} , e não mais v_i . Assim obtemos uma *leve* diferença que melhorará em muito nossos resultados. O método pode ser descrito por

$$\theta_{i+1} = \theta_i (v_{i+1} \Delta t) \quad (1.17)$$

$$v_{i+1} = v_i - \omega^2 \sin(\omega \theta_{i+1} \Delta t) \quad (1.18)$$

Aplicação dos Métodos e Resultados

Lembrando que

$$\omega^2 = \sqrt{\frac{g}{l}} \quad (1.19)$$

Tomaremos $g = 10 \text{ m/s}^2$ e $l = 10 \text{ m}$ assim obteremos $\omega = 1 \text{ rad/s}$, e não perdemos a generalização do método. Para cada um dos métodos foram tomados dois Δt , 0,1 e 0,5. Partimos de um caso em que $v_0 = 0$ então a constante de fase (ϕ) também é nula. Também foi tomado $\theta_0 = 0,1 \text{ rad}$, assim a solução analítica descrita na Equação (3) pode ser resumida em

$$\theta(t) = 0,1 \cos(t) \quad (1.20)$$

Na Figura 1 se encontram os gráficos do resultado analítico e de dois resultados para o método de Euler Explícito e dois para Euler-Cromer, com Δt correspondente dentro do parenteses.

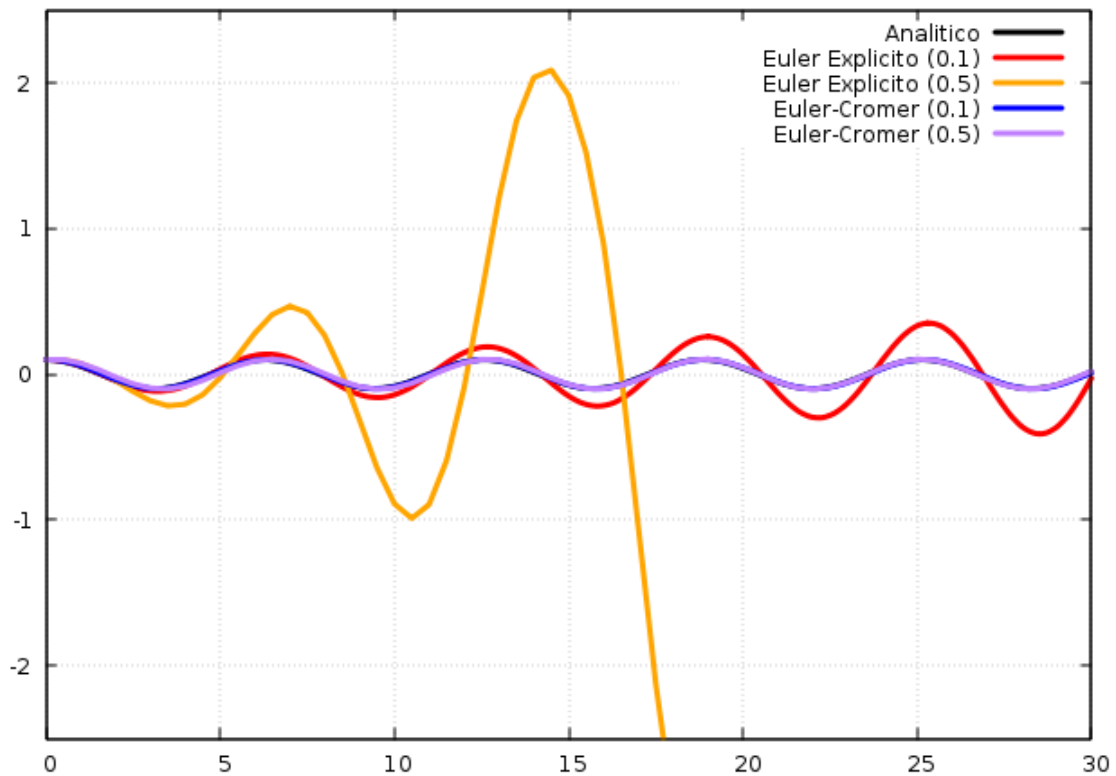


Figura 1.4: Gráficos do resultado analítico e de ambos métodos para diferentes Δt .

Podemos ver que o método de Euler Explícito falha, é apenas uma questão de onde. Quando tomamos um $\Delta t = 0,1 \text{ s}$ a oscilação vai começando a mudar quando t é próximo de 15 s . E quando usamos um $\Delta t = 0,5 \text{ s}$ a oscilação já sai completamente errada. O método de Euler-Cromer consegue aproximar com muita precisão, até ocultando o resultado analítico no gráfico. Podemos otimizar fazendo Δt cada vez menores. A mudança sutil feita no método permite que a energia do sistema permaneça constante ¹, enquanto no Euler Explícito ela aumenta gradativamente. Então podemos afirmar que, para o problema do pêndulo simples, o Método de Euler-Cromer é o mais adequado.

¹http://poleon.if.ufrgs.br/leon/metcomp/notas_de_aula.pdf

1.4 Euler-Cromer para Ângulos Grandes

O Pêndulo Simples

Sabemos da mecânica newtoniana que

$$m\ddot{\theta} = -m g \sin(\theta) \quad (1.21)$$

Para simplificar o problema fazemos uma aproximação que é válida apenas para ângulos pequenos. Consideramos então que

$$\sin(\theta) \approx \theta \quad (1.22)$$

O problema se torna uma Equação Diferencial que podemos resolver

$$\ddot{\theta} = -g \theta \quad (1.23)$$

Essa aproximação é válida apenas quando o ângulo é pequeno, menor ou igual a 15° . Estamos interessados em tratar planos de fase dessa Equação Diferencial, e descobrir o que acontece quando forçamos acima do limite de ângulos pequenos. Lembrando que Plano de Fase, ou Espaço de Fase, é um gráfico na forma:

$$f_{(\theta)} = \dot{\theta} \quad (1.24)$$

Iremos aplicar o Método de Euler-Cromer para resolver esse problema numericamente. E explorar o que acontece quando aumentamos os ângulos e mudamos as velocidades iniciais.

Euler-Cromer

O Método de Euler-Cromer é uma adaptação do Método de Euler Explícito. Por se tratar de uma Equação Diferencial de Segunda Ordem fazemos a seguinte mudança de variável

$$\dot{\theta} = v \quad (1.25)$$

Então descrevemos o método como

$$\theta_{i+1} = \theta_i (v_{i+1} \Delta t) \quad (1.26)$$

$$v_{i+1} = v_i - \omega^2 \sin(\omega \theta_{i+1} \Delta t) \quad (1.27)$$

A vantagem de usar Euler-Cromer ao invés de Euler Explícito está no fato de a energia se conservar². Iremos testar também se, mesmo para ângulos iniciais grandes, a energia se manterá a mesma.

²http://pcleon.if.ufrgs.br/leon/metcomp/notas_de_aula.pdf

Aplicação dos Métodos e Resultados

Como construímos o problema baseado em uma aproximação, podemos encontrar problemas se estivermos *longe* dela. A Figura 1³ mostra diversos gráficos de como o plano de fase muda conforme aumentamos o ângulo inicial (θ_0).

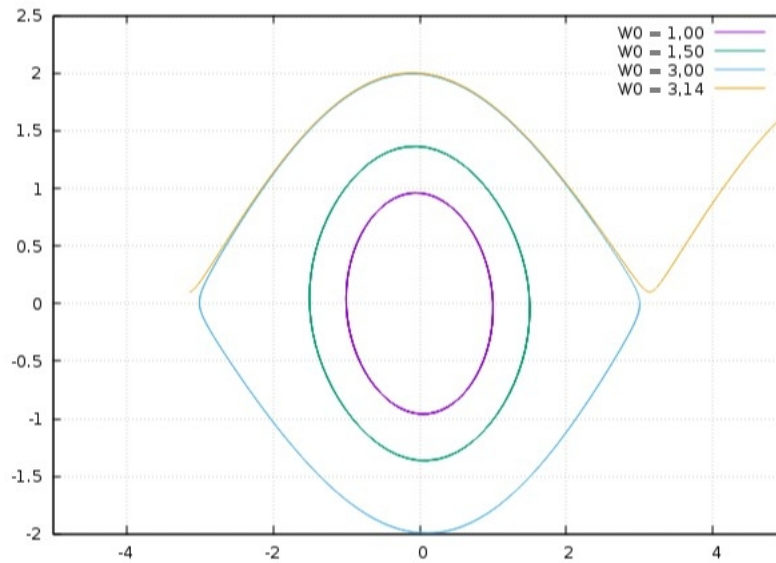


Figura 1.5: Planos de fase para diferentes ω_0

Olhando a Figura 1 fica claro que o problema possui limites. Conforme o ângulo inicial (θ_0) aumenta o plano de fase, que possui uma característica de elipse, se deforma. Se tomarmos $\theta_0 = 3,14$, algo próximo de π , o gráfico obtido é algo com a cara de uma oscilação que *quica*. Partindo de um valor inicial alto ele atinge um máximo e volta pelo mesmo lado, completando uma volta. A Figura 2 contém os gráficos de quando tomamos um ângulo inicial muito grande e colocamos uma velocidade inicial.

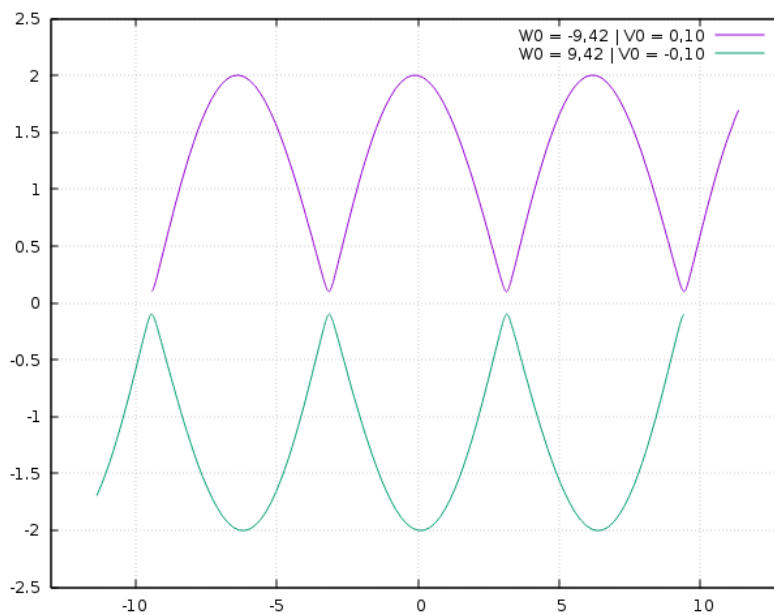


Figura 1.6: Planos de fase para ω_0 grandes e com velocidade inicial

³Nas figuras tome W_0 como ω_0

A Figura 2 é o que acontece em um dos gráficos da Figura 1. Partindo de um ângulo grande com velocidade inicial, o pêndulo fica completando voltas, e não oscila. A pergunta que pode surgir é o motivo disso. Como já comentado, o Método de Euler-Cromer conserva a energia do sistema. Isso implica em um sistema perfeito, onde não há dissipação alguma. A Figura 3 mostra os gráficos de Energia pelo Tempo.

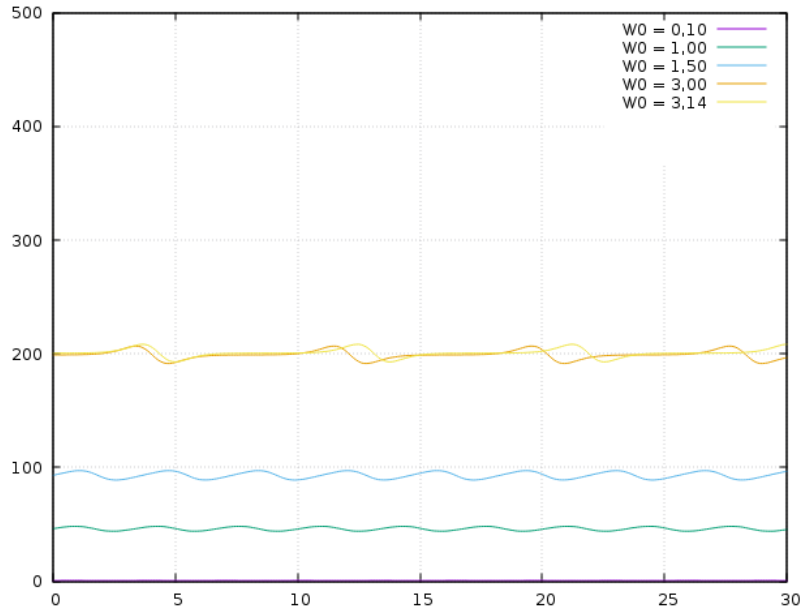


Figura 1.7: Gráficos de Energia pelo Tempo

Podemos, ver que a energia oscila um pouco, mas ciclicamente. Vemos que se o Δt diminui a energia tende a ter oscilações menores. É interessante notar que a energia que falamos é a Energia Mecânica (E_m) que nesse problema é descrito por:

$$U = \frac{1}{2}mgl^2v^2 + mgl(1 - \cos(\theta)) \quad (1.28)$$

Onde o primeiro termo é a Energia Cinética (E_k) e o segundo a Energia Potencial Gravitacional (U_g). E elas oscilam conforme o pêndulo se move, porém sua soma deve ser constante. Uma possível origem da oscilação na E_m pode ser que, para ângulos grandes e/ou com velocidade inicial, o pêndulo para um pouco quando atinge o ponto máximo.

1.5 Método de Verlet e Velocity-Verlet

O Pêndulo Simples

Sabemos da mecânica newtoniana que

$$m\ddot{\theta} = -m g \sin(\theta) \quad (1.29)$$

Para simplificar o problema fazemos uma aproximação que é válida apenas para ângulos pequenos. Consideramos então que

$$\sin(\theta) \approx \theta \quad (1.30)$$

O problema se torna uma Equação Diferencial que podemos resolver

$$\ddot{\theta} = -g \theta \quad (1.31)$$

Essa aproximação é válida apenas quando o ângulo é pequeno, menor ou igual a 15° . Estamos interessados em tratar planos de fase dessa Equação Diferencial, e descobrir o que acontece quando forçamos acima do limite de ângulos pequenos. Lembrando que Plano de Fase, ou Espaço de Fase, é um gráfico na forma:

$$f_{(\theta)} = \dot{\theta} \quad (1.32)$$

Iremos aplicar os métodos de Verlet e Velocity-Verlet para resolver esse problema numericamente. Também explorar o que acontece quando aumentamos os ângulos e mudamos as velocidades iniciais.

Método de Verlet

O método de Verlet tem como motivação uma expansão da série de Taylor, até a potência quatro, com Δt positivos e negativos. Para simplificação será apresentado apenas o resultado final do método. Escrevemos os algoritmos para posição e velocidade, respectivamente, da seguintes formas:

$$\omega_{n+1} = 2\omega_n - \omega_{n-1} + a\Delta t \quad (1.33)$$

$$v_n = \frac{\omega_{n+1} - \omega_{n-1}}{2\Delta t} \quad (1.34)$$

Velocity-Verlet

O algoritmo de Velocity-Verlet é uma adaptação do método de Verlet. Aqui a velocidade e a posição são calculados simultaneamente. Vale destacar que esse algoritmo só vale quando a posição não depende da velocidade. Podemos escrever as relações de posição e velocidade, respectivamente, como:

$$\omega_{n+1} = \omega_n + v_n\Delta t + \frac{1}{2}a_n(\Delta t)^2 \quad (1.35)$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2}(a_n + a_{n+1})\Delta t \quad (1.36)$$

Em sistemas conservativos o algoritmo de Velocity-Verlet faz a Energia oscilar próximo do valor. Poderemos ver isso graficamente mais adiante.

Aplicação dos Métodos e Resultados

Primeiro vamos ver o que acontece quando tomamos alguns ângulos (1, 1,5 e 3 rad) partindo de velocidade 0. A Figura 1 ⁴ mostra diversos gráficos de como o plano de fase muda conforme aumentamos o ângulo inicial (θ_0), Usando o Método de Verlet. A Figura 2 mostra as mesmas simulações, porém com o Velocity-Verlet.

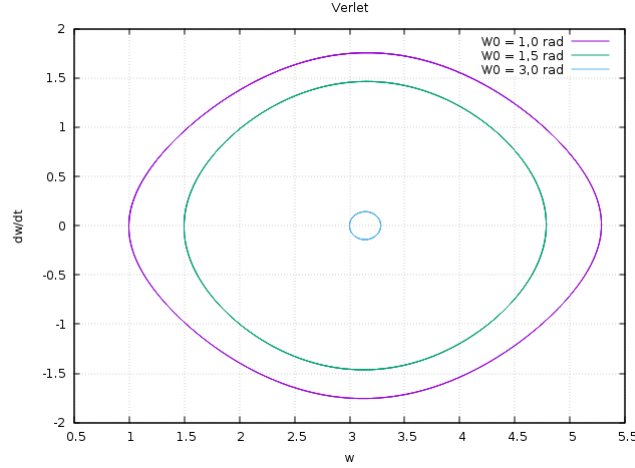


Figura 1.8: Planos de fase para diferentes ω_0 , usando Verlet.

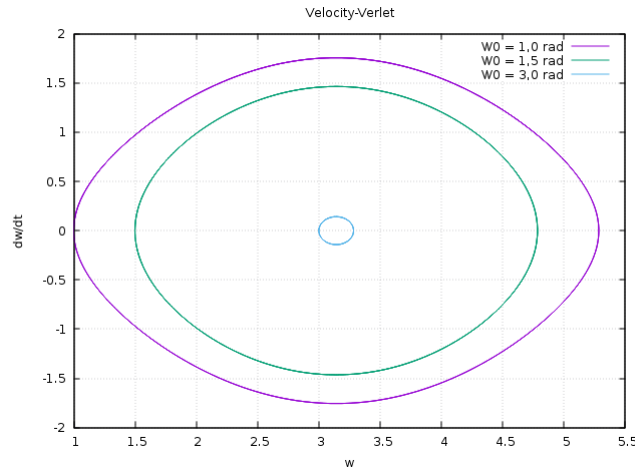


Figura 1.9: Planos de fase para diferentes ω_0 , usando Velocity-Verlet.

Podemos ver que existem poucas diferenças entre os planos de fase. Centrados em π eles descrevem como a velocidade varia em função do tempo. Vamos ver as energias desse sistema. Lembrando que a Energia total é descrita por:

$$E = \frac{1}{2}mgl^2v^2 + mgl(1 - \cos(\theta)) \quad (1.37)$$

Onde o primeiro termo é a Energia Cinética (E_k) e o segundo a Energia Potencial Gravitacional (U_g). E elas oscilam conforme o pêndulo se move, porém, por se tratar de um sistema conservativo ela deve ser constante. Numericamente ela deve, no máximo, oscilar perto do valor.

⁴Nas figuras tome W0 como ω_0

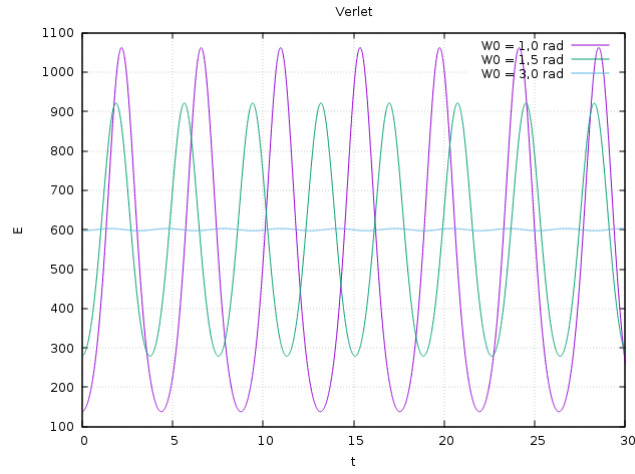


Figura 1.10: Planos de fase para $\omega_0 = \pi$, usando Verlet.

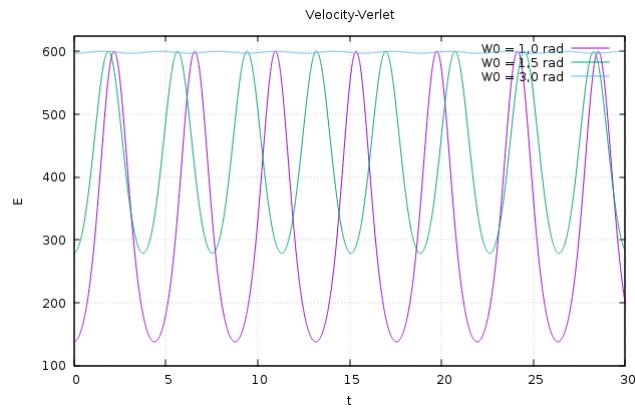


Figura 1.11: Planos de fase $\omega_0 = \pi$, usando Velocity-Verlet.

Por algum motivo a Energia total oscila muito quando possuímos ângulos iniciais pequenos e oscila pouco conforme eles diminuem. Um motivo da oscilação pode ser a velocidade inicial ser nula.

1.6 Runge-Kutta-2 e Runge-Kutta-4

Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem (RK2)

Estamos interessados em resolver EDO's expandindo até o termo de segunda ordem, como sugere o nome. Podemos expandir a equação diferencial da seguinte forma:

$$x_{n+1} = x_n + f(t_n; x_n)\Delta t + \frac{1}{2!}f'(t_n; x_n)\Delta t^2 \quad (1.38)$$

Então, aplicando o método de Runge-Kutta reescrevemos a equação:

$$x_{n+1} = x_n + (a_1k_1 + a_2k_2)\Delta t \quad (1.39)$$

$$k_1 \equiv f(t_n, x_n) \quad (1.40)$$

$$k_2 \equiv f(t_n + p_1\Delta t; x_n + q_{11}k_1\Delta t) \quad (1.41)$$

Se retornarmos a equação na equação obteremos o sistema:

$$a_1 + a_2 = 1$$

$$a_1p_1 = 1$$

$$a_2q_{11} = 1$$

E como podemos ver é um sistema de quatro variáveis e três equações. Então podemos escolher arbitrariamente o valor para uma delas e assim obter as outras.

Ponto Médio

Um dos métodos é conhecido como *Ponto Médio*. Nesse método escolhemos

$$a_2 = 1$$

Então obtemos o seguinte algoritmo

$$x_{n+1} = x_n + k_2\Delta t \quad (1.42)$$

$$k_1 = f(t_n, x_n) \quad (1.43)$$

$$k_2 = f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_1\Delta t}{2}\right) \quad (1.44)$$

Essa variação do Runge-Kutta de segunda ordem é equivalente ao método de Euler. O valor da tangente é uma estimativa baseado se entre t_n e t_{n+1} ⁵.

⁵http://pcleon.if.ufrgs.br/leon/metcomp/notas_de_aula.pdf

Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem (RK4)

O método de Runge-Kutta de quarta ordem também se baseia em uma expansão, porém até a ordem quatro⁶. A expansão tem um formato parecido com a da Equação 1, e o algoritmo proposto é:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{8}(k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4)\Delta t \quad (1.45)$$

Então obtemos as seguintes relações para os valores de dentro do parêntesis.

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

O método descrito aqui é conhecido como *RK4 3/8*.

Aplicação dos Métodos e Resultados

Os métodos RK2 e RK4 foram usados para o problema do decaimento exponencial. O problema, modelado em uma equação diferencial, se apresenta como:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) = -\frac{x}{\tau} \quad (1.46)$$

Já sabemos que a forma das curvas encontradas devem ser de um formato exponencial, parecidas com o resultado analítico. Como temos $x_0 = 10$ e $\tau = 2$ o resultado analítico possui o seguinte formato:

$$f(x) = 10e^{-\frac{x}{2}} \quad (1.47)$$

Foram realizadas simulações em ambos métodos para Δt iguais a 0,1 e 0,5⁷. A Figura 1 mostra as curvas de todas as simulações e o valor analítico. A Figura 2 mostra um zoom, para que seja possível ver que existe uma leve diferença entre os métodos.

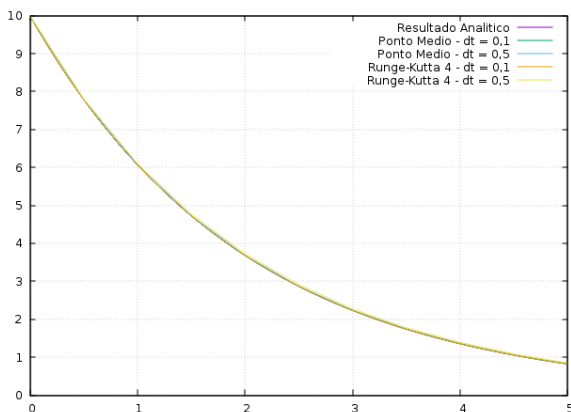


Figura 1: Diferentes resultados para os métodos RK2 e RK4.

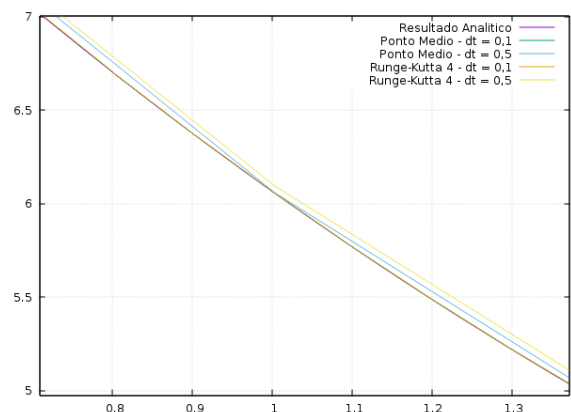


Figura 2: Diferentes resultados para os métodos RK2 e RK4.

Podemos ver que os métodos de integração obtiveram um resultado excelente. As curvas sobrepõem o resultado analítico, sendo necessário um zoom. Os métodos precisam ter uma certa

⁶Os nomes são bastante sugestivos.

⁷Nas figuras considere $dt = \Delta t$

divergência, pois possuem ordem diferentes, mas tem uma concordância quando se trata de ter um formato exponencial. Então pode-se dizer que os métodos funcionaram perfeitamente.

1.7 Erro em Resoluções de EDOs

Avaliação do Erro

Estamos interessados em saber a ordem do erro da integração numérica. Sabemos que o erro é proporcional ao passo que utilizamos. Podemos obter uma relação exata multiplicando por uma constante e obtendo a relação

$$\epsilon = a \Delta t^{n-1} \quad (1.48)$$

Onde ϵ é o erro, a é a constante, Δt é o passo e $n - 1$ é a ordem do erro. Como queremos descobrir o fator $n - 1$ podemos usar propriedades logarítmicas para explicitar o termo do erro.

$$\ln(\epsilon) = (n - 1) \ln(\Delta t) + \ln(a) \quad (1.49)$$

O erro é calculado obtendo a diferença entre o valor analítico e o obtido pela integração. A equação diferencial escolhida para a análise foi a equação do pêndulo simples apresentada da seguinte forma:

$$\ddot{\theta} + g\theta = 0 \quad (1.50)$$

Sabemos que os resultados analíticos para a posição e a velocidade são

$$\theta(t) = \theta_0 \cos(\omega t + \phi) \quad (1.51)$$

$$v(t) = -\theta_0 \sin(\omega t + \phi) \quad (1.52)$$

Assim, se obtivermos valores de erro e de passo podemos fazer um ajuste linear e obter a ordem do erro. Por se tratar de uma equação diferencial de segunda ordem, obteremos um valor de erro para a posição e um para a velocidade. Iremos averiguar a ordem do erro de três métodos, Euler-Cromer, Runge-Kutta de Segunda Ordem e Runge-Kutta de Quarta Ordem.

Euler-Cromer

Na Figura 1 esta o gráfico, em escala logarítmica, do erro multiplicado pelo número de variações pelo passo usando o método de Euler-Cromer.

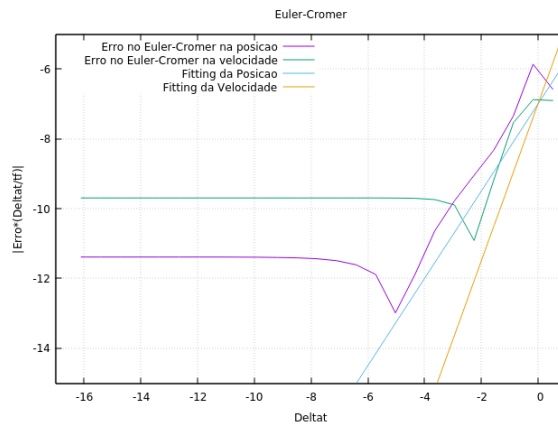


Figura 1.12: Erros da posição e velocidade e retas com a ordem do erro, usando o método de Euler-Cromer.

O método de Euler-Cromer apresentou uma diferença entre os erros da posição e da velocidade. Podemos ver que possuímos um erro que vem constante, decai e sobe de forma de uma reta. Estamos interessados no grau dessa reta. Fazendo um ajuste linear para ambos erros encontramos as ordens dos erros.

$$\begin{aligned}\text{Grau do Erro da Posição} &\approx 1 \\ \text{Grau do Erro da Velocidade} &\approx 2\end{aligned}$$

A constante está relacionada com a equação diferencial, sendo específica para cada caso. Obtemos que os erros do método Euler-Cromer possuem ordem um (1) para a posição e dois (2) para a velocidade. As retas na Figura 1 possuem os graus do erro e estão ali para comparação.

Runge-Kutta de Segunda Ordem

Na Figura 2 está o gráfico do erro vezes o número de variações em função do passo, também em escala logarítmica, usando o método de Runge-Kutta2

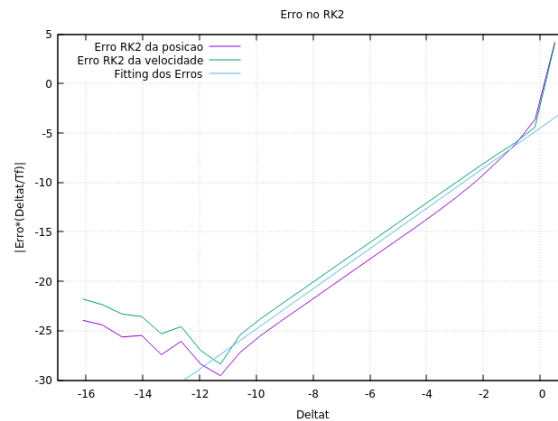


Figura 1.13: Erros da posição e velocidade e a reta com a ordem do erro, usando o método de Runge-Kutta 2.

Olhando o gráfico podemos ver que o erro da posição possui mesma ordem que o erro da velocidade. O erro não converge para passos pequenos e nem para passos grandes, então fazendo um ajuste linear na parte que apresenta uma forma de reta obtemos a ordem do erro.

$$\begin{aligned}\text{Grau do Erro da Posição} &\approx 2 \\ \text{Grau do Erro da Velocidade} &\approx 2\end{aligned}$$

Novamente, a constante está relacionada com cada caso de equação diferencial. O método de Runge-Kutta de Segunda Ordem não apresenta diferença ordem no erro entre posição e velocidade, sendo ambos dois (2). A reta na Figura 2 possui o grau do erro e está para comparação.

Runge-Kutta de Quarta Ordem

Na Figura 3 está o gráfico do erro multiplicado pelo número de variações em função do passo, também em escala logarítmica, usando o método de Runge-Kutta 4.

Novamente, o erro da posição possui mesma ordem que o erro da velocidade. Não convergindo para passos pequenos ou passos grandes. Da mesma forma que no método de Runge-Kutta 2, fazemos o ajuste linear na parte que apresenta uma forma de reta obtemos a ordem do erro.

$$\begin{aligned}\text{Grau do Erro da Posição} &\approx 4 \\ \text{Grau do Erro da Velocidade} &\approx 4\end{aligned}$$

O método de Runge-Kutta possui a mesma ordem do erro para posição e velocidade, sendo quatro (4). A reta na Figura 3 possui o grau do erro e serve de comparação.

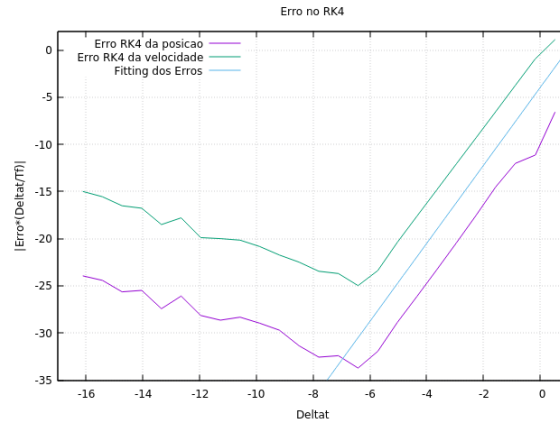


Figura 1.14: Erros da posição e velocidade e a reta com a ordem do erro, usando o método de Runge-Kutta 4.

Considerações

A relação de erro para as posições de cada método se encontram na Tabela 1.

Método	Ordem do Erro
Euler-Cromer	1
Runge-Kutta 2	2
Runge-Kutta 4	4

Tabela 1.3: Erros nas posições para os correspondentes métodos.

E como a constante (a) é específica para cada equação, podemos assumir que o erro global para cada método sempre seguirá a relação aqui proposta. É interessante notar que esse é o erro global. Os métodos numéricos também possuem o erro pelo truncamento, que não foi tratado aqui.

1.8 Integração por Passos Variáveis

Passos Variáveis

Queremos resolver uma equação diferencial supondo que não conhecemos seu valor analítico, do tipo:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \quad (1.53)$$

Iremos integrar o Método dos Passos Variáveis. O método supõem que, se integrarmos a função usando Runge-Kutta de Segunda Ordem (RK2), podemos tomar como valor "*analítico*" o resultado da integração pelo método de Runge-Kutta de Quarta Ordem (RK4). Entretanto, existe a necessidade de corrigir o passo conforme a integração numérica vai sendo realizada. A cada um número m de passos precisamos corrigir o Δt (passo) que estamos aplicando, na integração usando RK2, comparando com o resultado caso estivesse sendo usado RK4. Calculamos o novo Δt , a cada m passos, usando a seguinte relação:

$$\Delta t_n = \Delta t \left(\frac{tol}{\epsilon_c} \right)^{\frac{1}{n}} \quad (1.54)$$

Onde, Δt_n é o novo passo, tol é o erro tolerado, ϵ_c é o erro corrente e n é o erro de truncamento. ϵ_c é calculado usando:

$$\epsilon_c = \sqrt{|(x_{RK4} - x)^2 - (x_{RK2} - x)^2|} \quad (1.55)$$

Onde x_{RK4} é a integração usando RK4, x_{RK2} é integração usando RK2 e x depende da posição inicial e atual.

Equação Logística

A equação logística se apresenta da seguinte forma:

$$\frac{dx}{dt} = 0.1x(2 - x) \quad (1.56)$$

Iremos aplicar o Método dos Passos Variáveis para resolver numericamente essa equação. Primeiramente precisamos definir alguns valores que são constantes da eq. (2). Tomaremos:

$$tol = 10^{-4}$$

$$n = 3$$

n tem esse valor por causa que usamos RK2, onde o erro de truncamento está na terceira ordem. E o Δt é corrigido a cada dez passos. O resultado da integração esta na Figura 1:

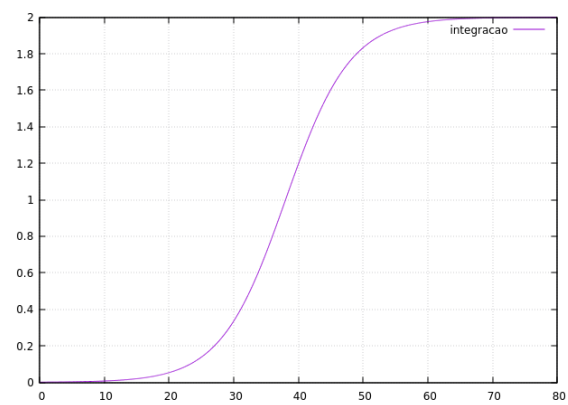


Figura 1.15: Integração por Passos Variáveis

1.9 Integração por Multipassos

Queremos resolver a equação diferencial (1) supondo que não conhecemos seu valor analítico

$$\frac{dx}{dt} = 0.0001 x (2 - x) \quad (1.57)$$

Iremos utilizar o Método dos Multipassos para integrar. Existem dois métodos principais, Adams-Bashforth e Adams-Moulton. O método tem um caso geral, que não será mostrado aqui, onde é escolhido a ordem de precisão. Para o nosso caso utilizaremos Adams-Bashforth de primeira ordem e Adams-Moulton de segunda ordem. Os algoritmos para cada caso podem ser descrito, respectivamente, da seguinte forma:

$$x_{n+1} = x_n + \left(\frac{3}{2}f(x_n) - \frac{1}{2}f(x_{n-1})\right)\Delta t \quad (1.58)$$

$$x_{n+1} = x_n + \left(\frac{5}{12}f(x_{n+1}) + -\frac{2}{3}f(x_n) - \frac{1}{12}f(x_{n-1})\right)\Delta t \quad (1.59)$$

Iremos utilizar ambos de forma simultânea, os comparando. Essa comparação leva a um método chamado Preditor-Corretor. Preditor-Corretor basicamente é um método que avança duas etapas por vez. A primeira faz uma estimação grosseira do problema (preditor). A segunda por sua vez refina o resultado obtido (corretor). Assim, usando a integração pelo método dos multipassos, iremos aplicar o método do preditor-corretor para melhorar o resultado.

Resolução

Aplicando o Método dos Multipassos, para a eq(2). obtemos o seguinte resultado de integração para diferentes Δt . Nas Figuras (1) e (2) é possível ver os gráficos da resolução pelo método de Adams-Bashforth. É possível ver que para Δt pequeno a curva de resolução se misturam entre si. Para valores maiores podemos ver uma discrepância entre a curva

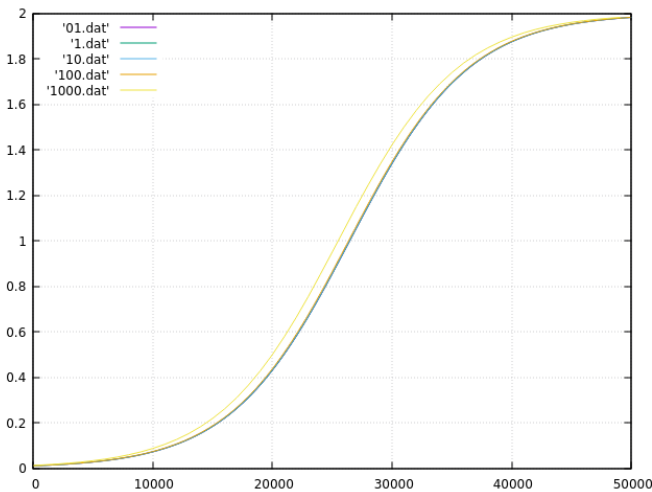


Figura 1: Resultados para diferentes Δt .

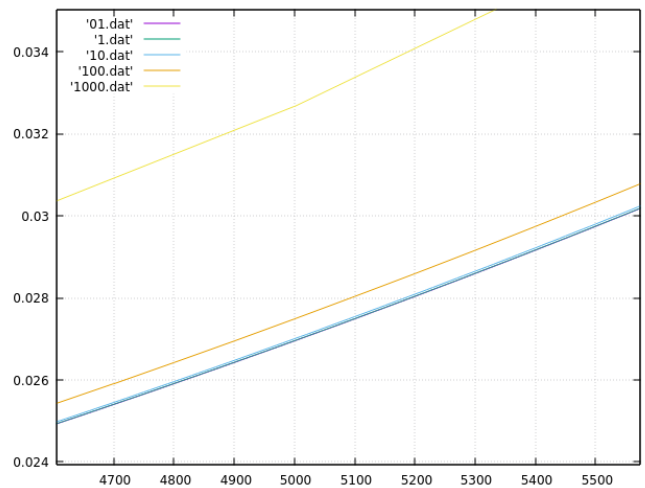


Figura 2: Resultados para diferentes Δt (zoom).

Podemos ver que para Δt pequenos a solução vai convergindo pra um formato quase idêntico e para Δt grande vai sendo discrepante. Então introduzindo Adams-Moulton podemos utilizar o método preditor-corretor. As Figuras (3) e (4) mostram os resultados da resolução por preditor-corretor, com dois Δt diferentes, comparados com o método de Adams-Bashforth.

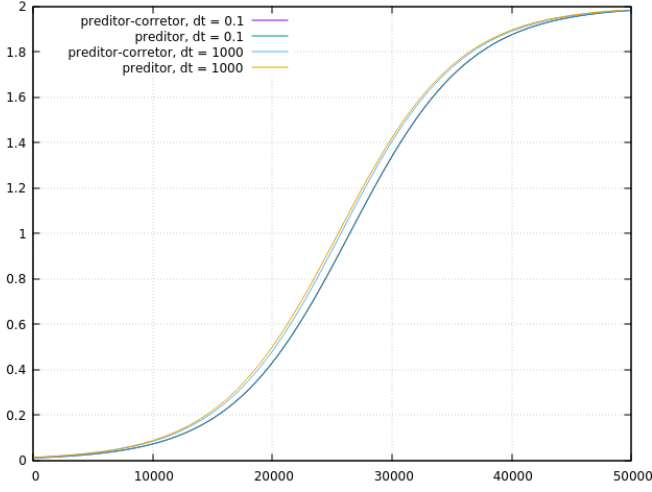


Figura 3: Comparação entre os métodos para dois Δt .

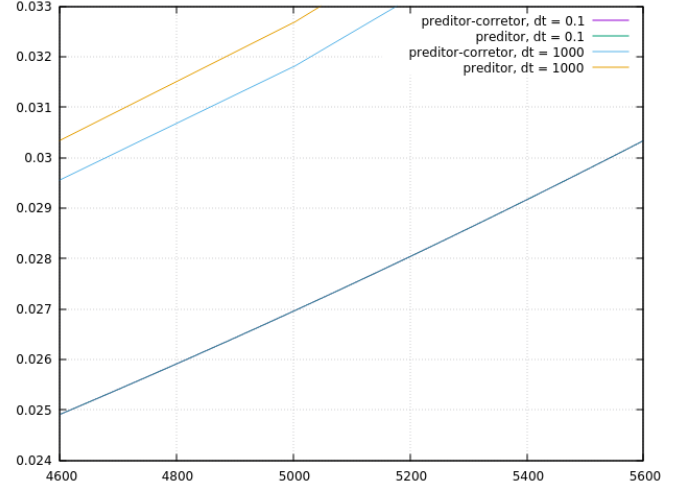


Figura 4: Comparação entre os métodos para dois Δt (zoom).

Vemos que quando o método de Adams-Moulton é introduzido como corretor a solução tende mais para o formato da resolução, mesmo para Δt grandes. Podendo ser obtido valores melhores quando Δt vai diminuindo. No nosso caso precisamos de um tempo muito grande para realizar o resultado numérico, na ordem de 5×10^4 , então um tempo muito pequeno não influencia a forma de nossos resultados.

Capítulo 2

Área 2 - Mapas

2.1 Mapa de Bifurcações e Coeficiente de Lyapunov

Equação Logística

A Equação Logística se apresenta da seguinte forma:

$$f(x) = \lambda x (1 - x) \quad (2.1)$$

Queremos avaliar o comportamento da eq. (1) conforme variamos o coeficiente (λ). Uma forma de fazer isso é analisando a equação discretamente, fazendo:

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

A Figura (1) mostra o gráfico de x_n em função de λ , conhecido como Mapa de Bifurcações.

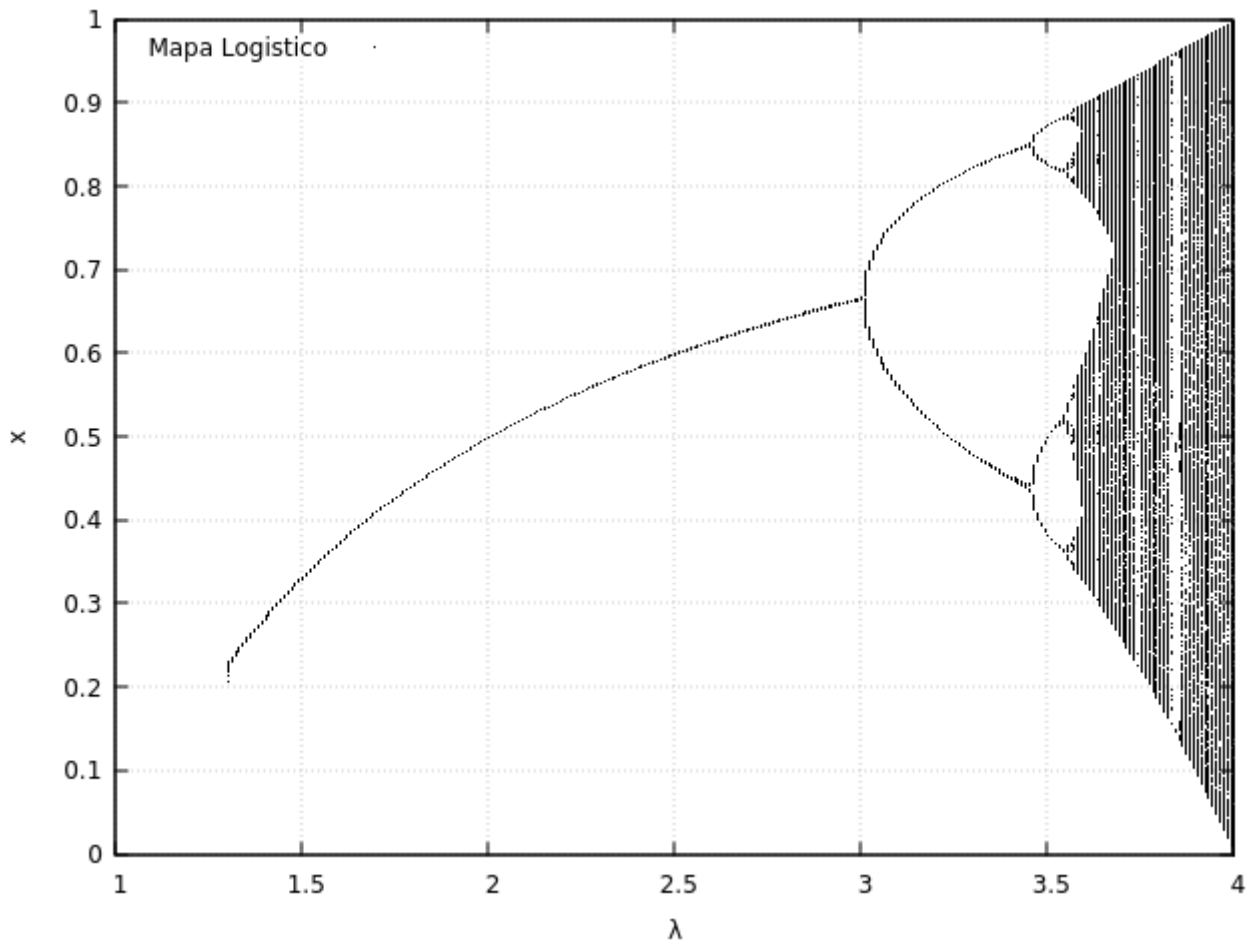


Figura 2.1: Mapa de Bifurcações.

Podemos ver na Figura onde ocorrem as bifurcações para o ciclo 2 e ciclo 4. Um zoom na imagem mostraria os outros ciclos. É possível ver que, conforme a literatura [?], a zona caótica ocorre para valores levemente maiores que 3,57. O mapa mostra os ciclos, os valores aproximados de bifurcação e a entrada pra zona caótica.

Coeficiente de Lyapunov

Estamos interessados em saber como se relacionam duas trajetórias que diferem por um valor pequeno, como por exemplo, x_0 e $x_0 + \delta_n$. Assumindo que δ_n é pequeno podemos expandir ao redor de x_n , resultando em:

$$\delta_{n+1} = f'(x_n)\delta_n \quad (2.3)$$

Podemos então realizar a razão após n passos, da forma:

$$\left| \frac{\delta_n}{\delta_0} \right| = \prod_{i=0}^{n-1} |f'(x_i)| \quad (2.4)$$

Onde, aplicando o logaritmo obtemos o Coeficiente de Lyapunov (λ_L):

$$E_L = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln |f'(x_i)| \quad (2.5)$$

A Figura (3) mostra o Coeficiente de Lyapunov em função do fator r .

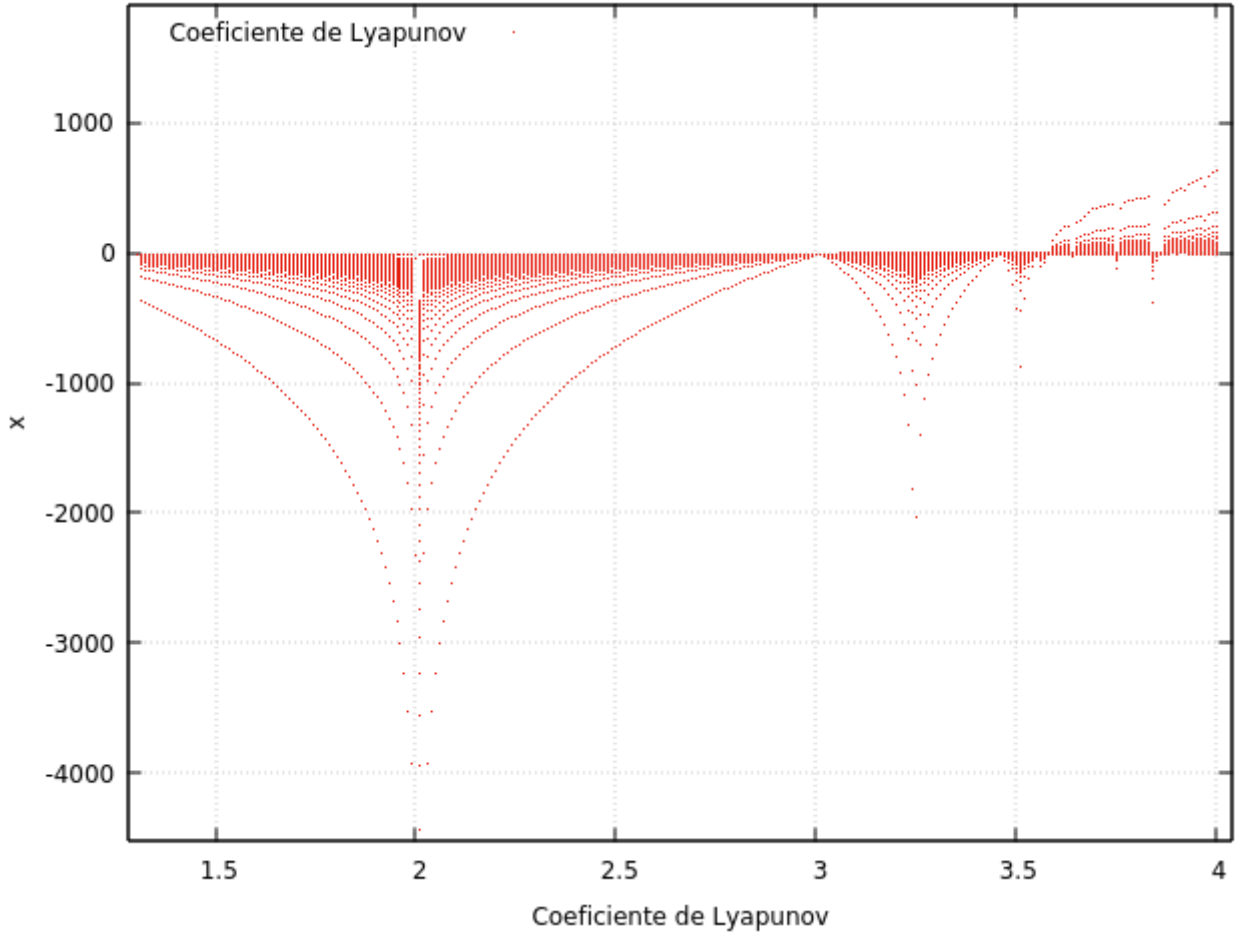


Figura 2.2: Coeficiente de Lyapunove em função de r

Podemos ver que, o Coeficiente é negativo para valores onde existe um ciclo, e positivo quando entra no caos ($\approx 3,57$). Também vemos que ele tende a zero em pontos de bifurcação, com pontos semelhantes aos do Mapa das Bifurcações.

2.2 Cellular Automata e Jogo da Vida

Cellular Automata

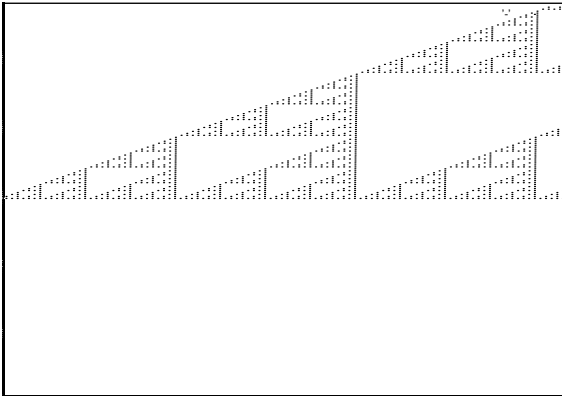
Autômatos Celulares são modelos simples que podem assumir comportamentos complicados com o passar da evolução temporal. Tal evolução temporal da célula depende do seu estado e do estado dos seus vizinhos no tempo. Uma célula pode assumir um entre dois valores: 0 ou 1, sendo então possível 2^n combinações, sendo n o número de células envolvidas na evolução. Então, cada um desses estados pode representa o futuro da célula, 0 ou 1. Esse número de combinações está ligada a um fator importante, que é chamado de regra. A regra é um número inteiro limitado entre zero e $2^{(2^n)} - 1$, e ela dita o comportamento do nosso sistema, como será discutido na próxima seção. Iremos explorar dois casos, o unidimensional e o Jogo da Vida de Conway.

Unidimensional

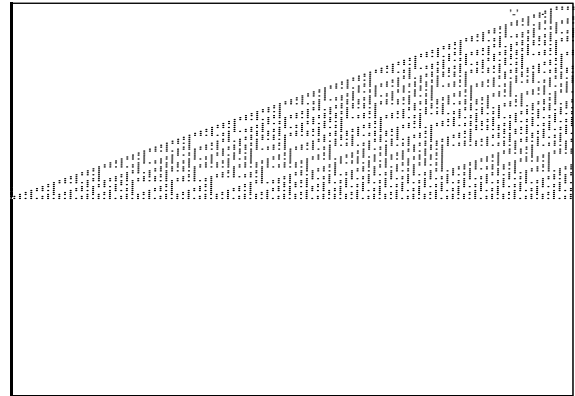
No caso unidimensional precisamos imaginar que grupo de células um do lado da outra, formando uma espécie de fila. Dessa forma cada célula possui duas vizinhas e aplicando a relação podemos saber o número de regras para esse sistema.

$$2^8 = 256 \text{ regras}$$

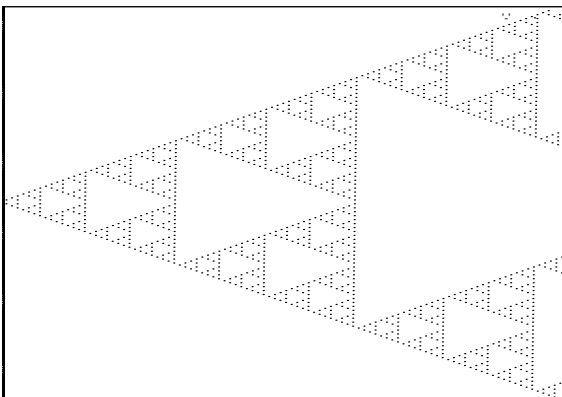
Que variam no conjunto $[0:255]$. Assim, escolhendo regras diferentes obtemos resultados diferentes. Abaixo se encontram quatro evoluções de um automata celular organizado, correspondente as regras: 60, 62, 90 e 110.



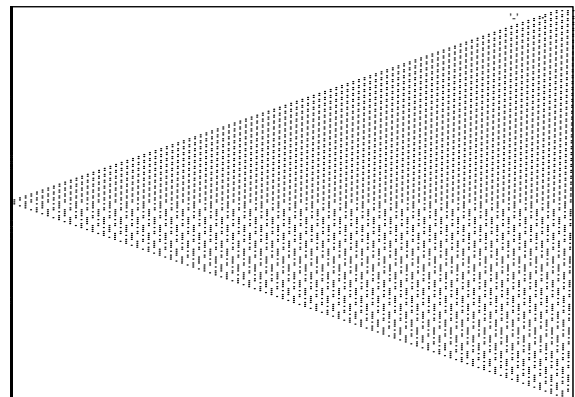
Regra 60.



Regra 62.



Regra 90.



Regra 110.

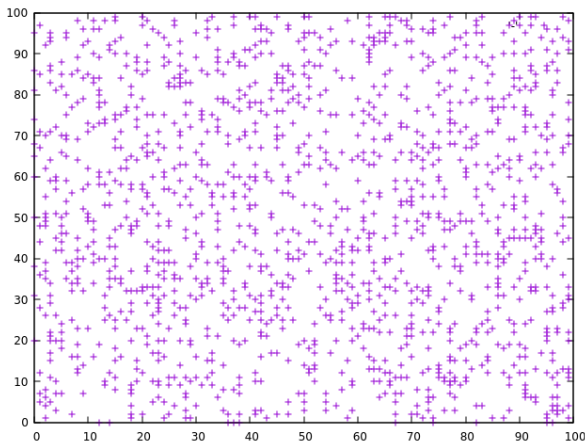
As imagens estão rotacionadas para melhor visualização. Podemos ver que, como esperado, cada regra define um comportamento único do sistema.

Jogo da Vida

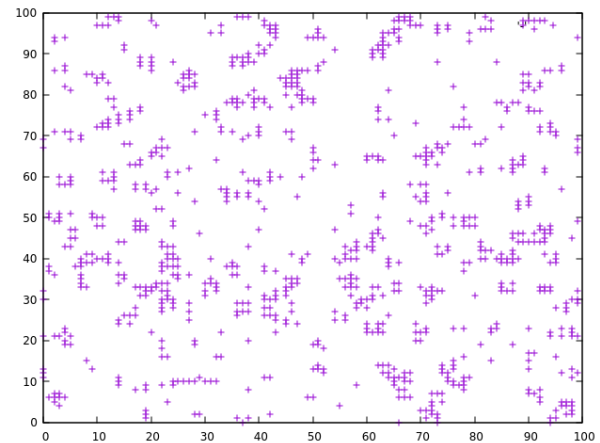
O Jogo da Vida é o exemplo mais conhecido de automata celular. Diferentemente do caso unidimensional de automata celular o jogo da vida possui regras definidas que alteram o estado da célula no tempo. Esse é um caso bidimensional, assim cada célula possui oito vizinhos. A regra utilizada aqui é a mesma para toda rede, e pode ser resumida da forma:

- 0, se o número de vizinhos forem menores que o mínimo ou maiores que o máximo;
- 1, se o número de vizinhos estiver entre o mínimo e máximo.

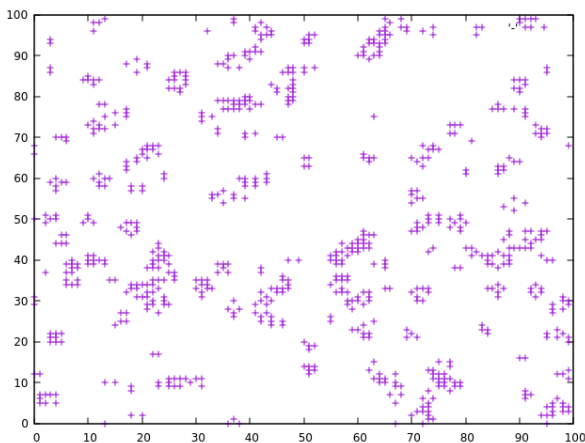
Onde mínimo e máximo são valores estabelecidos de vizinhos. 0 e 1 são possíveis estados da célula. Abaixo vemos uma evolução temporal de um jogo da vida que foi definido número mínimo de vizinhos (Z_{min}) como 3 e máximo (Z_{max}) como 4.



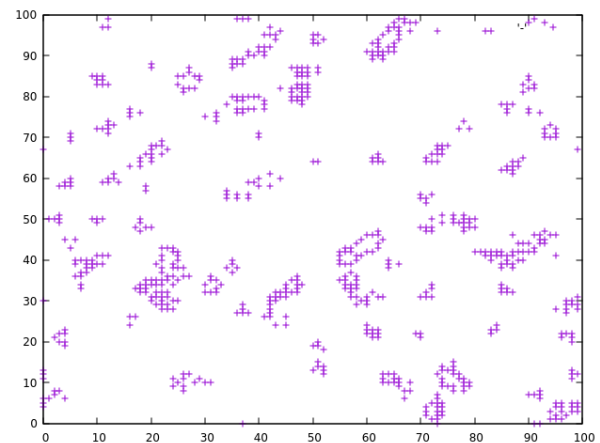
Tempo 0.



Tempo 1.



Tempo 2.



Tempo 3.

Assim, podemos ver como o sistema evolui de condições aleatórias (Tempo 0) para a Figura vista no Tempo 3.

Considerações Finais

Embora tenha sido extremamente difícil a realização destes trabalhos foi o mais interessante realizado na disciplina até agora. Possui muitas referências online e diversas aplicações. Será excelente estudar mais isso futuramente. Agradecimento especial ao Nature of Code ¹

¹<https://natureofcode.com/book/chapter-7-cellular-automata/>

2.3 Matriz de Recorrência para o Mapa Logístico

Matriz de Recorrência

Estamos interessados em analisar a matriz de recorrência para o mapa logístico. A matriz, da forma $i \times j$ tem valor unitário quando a diferença absoluta dos valores das coordenadas é menor que um valor estabelecido (r_0). Podemos montar a matriz baseada na função de Heaviside (função salto), da forma:

$$H(x - r_0) = \begin{cases} 0, & |x_i - x_j| \geq r_0 \\ 1, & |x_i - x_j| < r_0 \end{cases} \quad (2.6)$$

A equação (1) nos diz que a função terá grandeza de unidade caso o valor da diferença seja menor que r_0 . Assim, aplicamos ao mapa logístico, que tem já conhecida. Queremos montar matrizes de recorrência para o mapa logístico. Definindo o parâmetro r_0 como 10^{-3} podemos montar matrizes com uma dimensão relativamente pequena, por exemplo, 300 x 300.

Resultados

Abaixo encontram-se seis matrizes para diferentes valores de λ e mesmo $r_0 = 10^{-3}$.

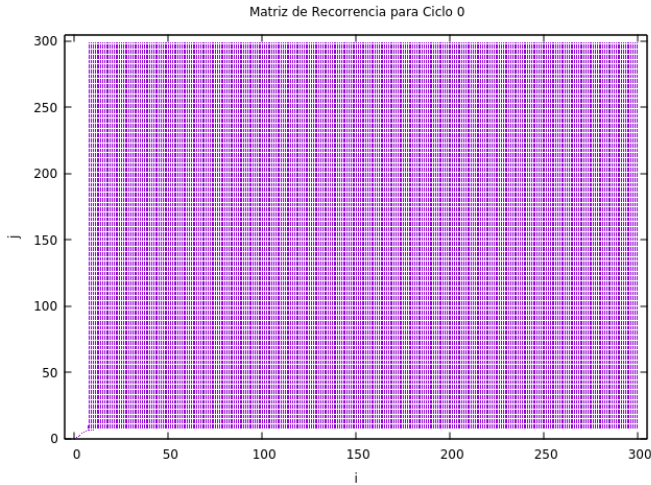


Figura 1: Matriz de recorrência para o ciclo 0.

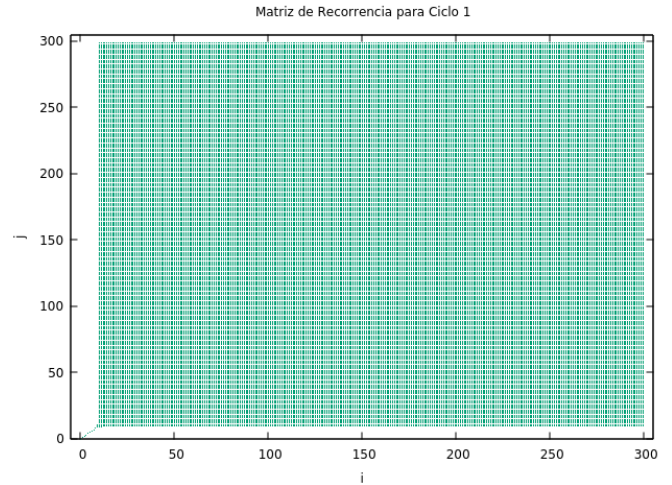


Figura 2: Matriz de recorrência para o ciclo 1.

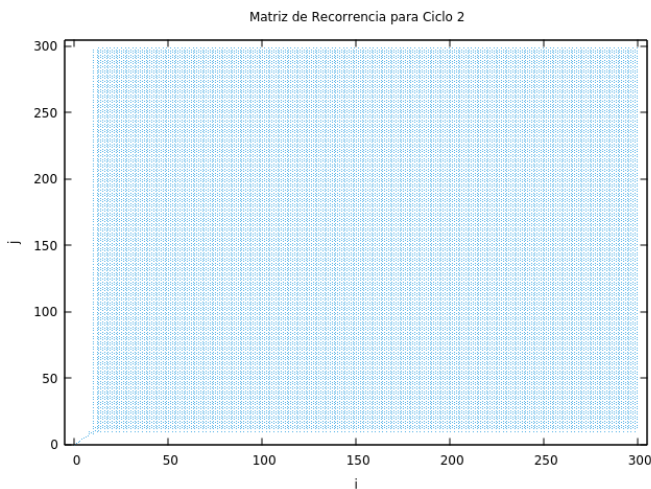


Figura 3: Matriz de recorrência para o ciclo 2.

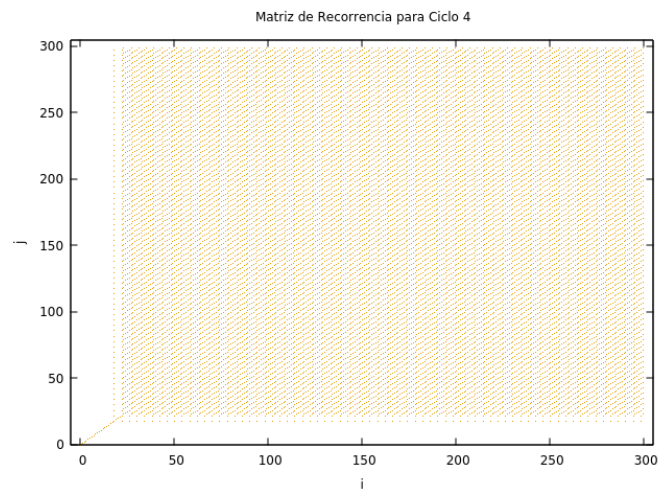


Figura 4: Matriz de recorrência para o ciclo 4.

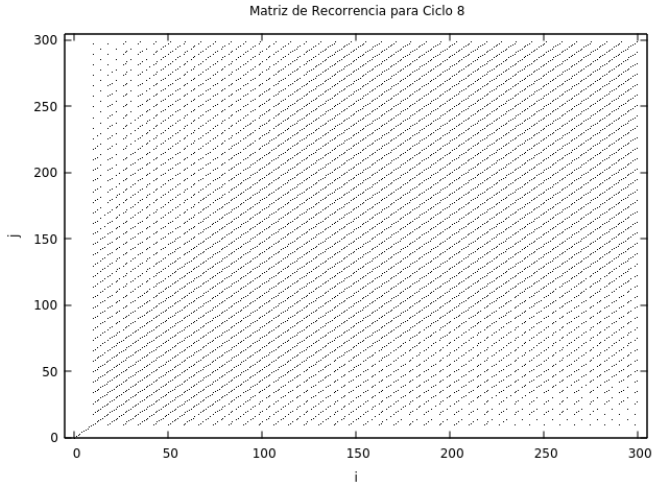


Figura 5: Matriz de recorrência para o ciclo 8.

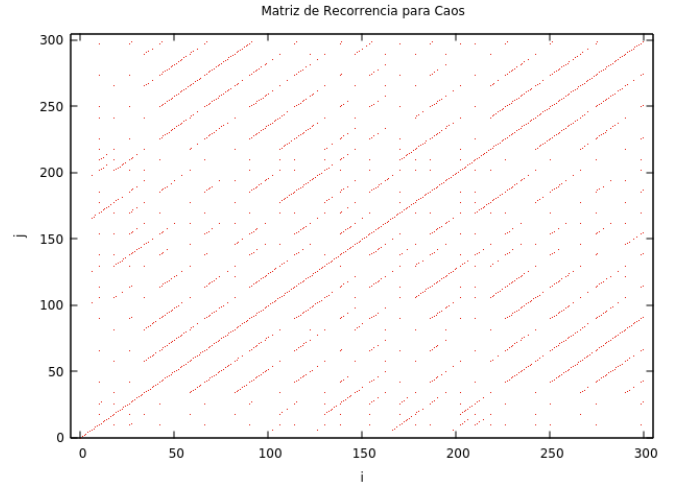


Figura 6: Matriz de recorrência para o caos.

As matrizes tem valores de λ característicos para alguns ciclos. Os valores foram escolhidos para que fossem gerar tais ciclos. Uma outra forma de ver isso seria que, para as matrizes que tem ciclo, a diferença entre duas coordenadas adjacentes é exatamente o valor do ciclo. Esse é o motivo para qual os ciclos menores tem matrizes mais cheias.

Capítulo 3

Área 3 - Números Aleatórios

3.1 Números Aleatórios

Gerador Linear

O gerador linear é o mais simples dos geradores de números aleatórios, depende apenas do valor anterior. O exemplo mais conhecido é

$$x_{n+1} = (ax_n + b)\%m \quad (3.1)$$

Onde a , b e m são números naturais inteiros, e $\%$ significa que o valor obtido é a parte inteira da divisão. Assim, escolhendo valores arbitrários para as constantes, podemos identificar o período do gerador. O período é definido como o número de números aleatórios que o gerador obtém antes de repetir o valor inicial. Para o nosso caso foi escolhido que $a = 4$, $b = 3$, $m = 100$ e $x_0 = 51$. Assim, para essas escolhas de constantes obtemos que o período do gerador é 10. Podemos ver isso realizando um gráfico do número aleatório em função da interação, como mostrado abaixo.

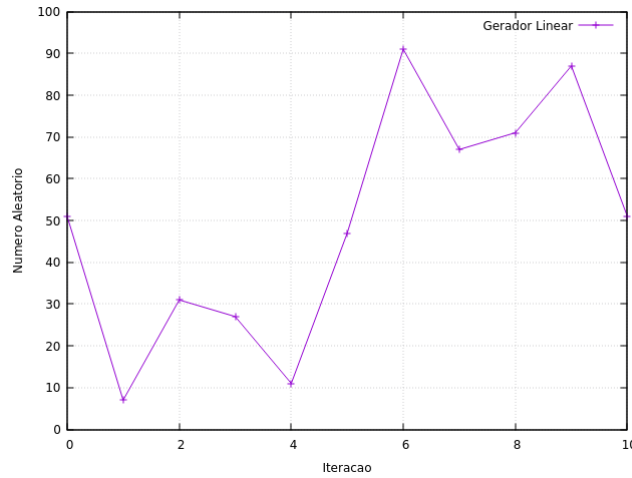


Figura 3.1: Número Aleatório em função da interação

Método de Schrage

O Método de Schrage consiste em fazer algumas modificações na equação do Gerador Linear. Primeiramente consideramos $b = 0$ e então fatoramos m da forma $m = aq + r$. O método então pode ser descrito como

$$x_{n+1} = \begin{cases} a(x_n \% q) - r(x_n \% q), & \text{se } \leq 0 \\ a(x_n \% q) - r(x_n \% q) + m, & \text{seno} \end{cases} \quad (3.2)$$

Onde, novamente, as constantes são números naturais inteiros e $\%$ significa que o valor obtido é a parte inteira da divisão. Escolhendo os seguintes valores $a = 16807$, $m = 2147483647$, $q = 127773$ e $r = 2836$ obtemos um período de $2^{31} - 2 \approx 2,1 \times 10^9$. Não foi possível gerar um gráfico do período do Método de Schrage pois, como citado, são muitos números. A tentativa de gerar esse gráfico criou um arquivo de 21Gb e não chegou perto do período. Sorte que eu não estava no lief.

3.2 Números Aleatórios - Schrage

O Método de Schrage

O Método de Schrage consiste em fazer algumas modificações na equação do Gerador Linear. Primeiramente consideramos $b = 0$ e então fatoramos m da forma $m = aq + r$. O método então pode ser descrito como

$$x_{n+1} = \begin{cases} a(x_n \% q) - r(x_n \% q), & \text{se } \leq 0 \\ a(x_n \% q) - r(x_n \% q) + m, & \text{seno} \end{cases} \quad (3.3)$$

Onde, as constantes são números naturais inteiros e $\%$ significa que o valor obtido é a parte inteira da divisão. Escolhendo os seguintes valores

$$a = 16807$$

$$m = 2147483647$$

$$q = 127773$$

$$r = 2836$$

obtemos um período de $2^{31} - 2 \approx 2,1 \times 10^9$.

Histograma de Schrage

Estamos interessados na distribuição dos números aleatórios gerados pelo método de Schrage. Escolhendo um intervalo do tipo

$$0 < x < L$$

com L fixo e gerando N números podemos analisar a distribuição realizando um histograma. Abaixo se encontram histogramas para $L = 100$ e N variando.

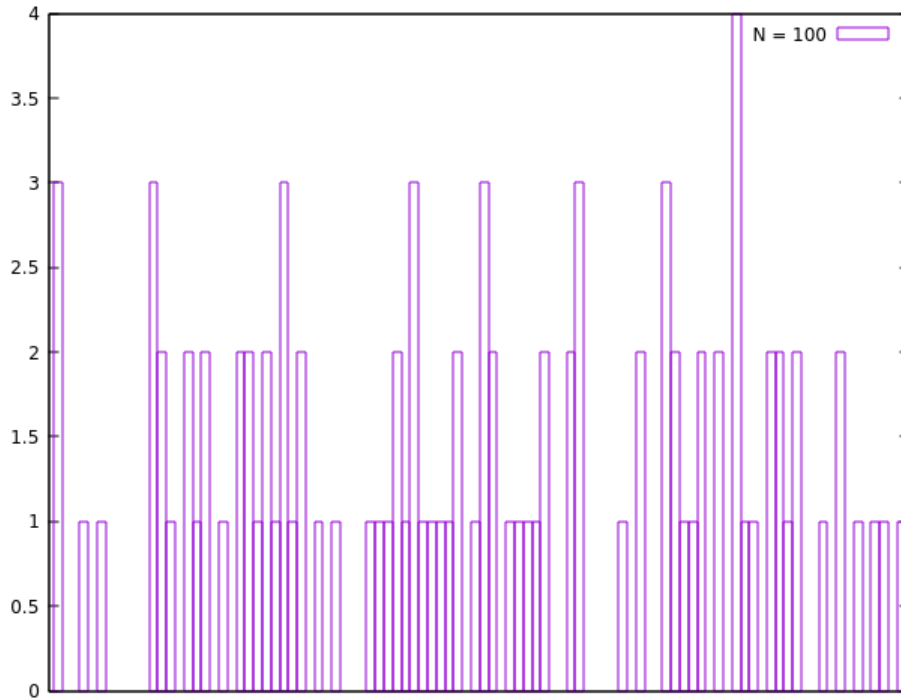


Figura 3.2: $N = 100$.

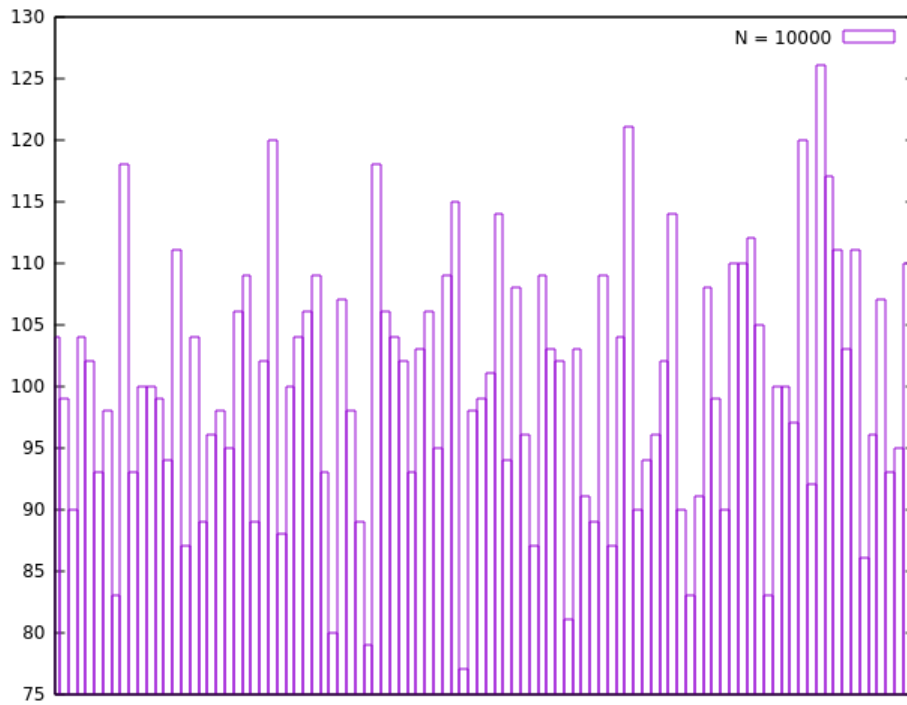


Figura 3.3: $N = 1000$.

N	Média	Desvio Padrão
100	1	0
1000	10	3
10000	100	10

Tabela 3.1: Médias e Desvios

Onde cada barra equivale ao número sorteado (eixo X) e sua altura corresponde a quantas vezes ele aparece (eixo Y). Então, realizando a média e o desvio padrão dos três histogramas encontramos os seguintes resultados:

Aparentemente ocorreu algum problema na média quando $N = 1000$. O padrão que segue os outros resultados sugere que o desvio padrão deveria ser 1. Envio o programa em anexo para que um possível erro seja reparado. Os outros histogramas não sugerem um erro.

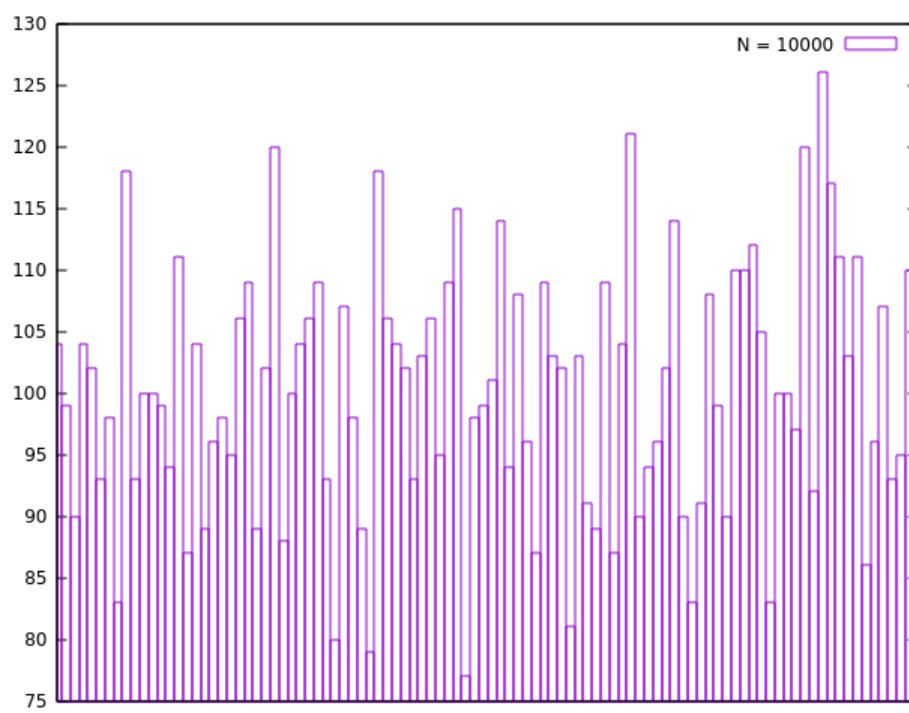


Figura 3.4: $N = 10000$.

3.3 Caminhante Aleatório - Distribuição Contínua

O Caminhante

O Caminhante aleatório é um objeto pontual que realiza passos sucessivos, de um comprimento Δx variável ou fixo, em um tempo discreto. Estamos interessados em avaliar o comportamento de caminhantes aleatórios cujos passos são dados pela seguinte função de probabilidade:

$$\delta(x+2) = \begin{cases} 0, & -2 > x \\ A, & -2 < x < 2 \\ 0, & 2 < x \end{cases} \quad (3.4)$$

E como a função deve ter a integral igual a 1, vemos que $A = 1/4$. Assim queremos que o caminhante aleatório tenha passos que tenham tamanho definidos no intervalo $[-2;2]$.

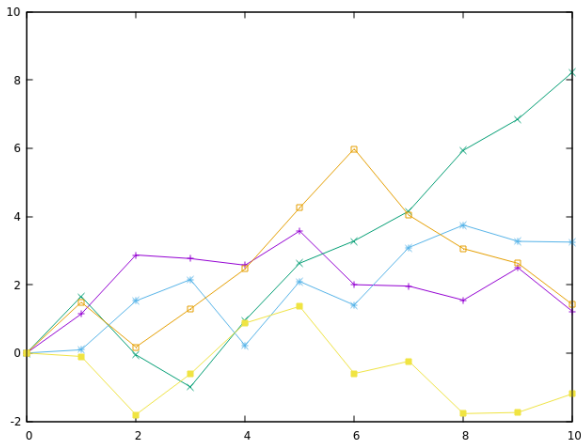
Sabemos também que

$$\langle X^2 \rangle = N \langle \sigma^2 \rangle \quad (3.5)$$

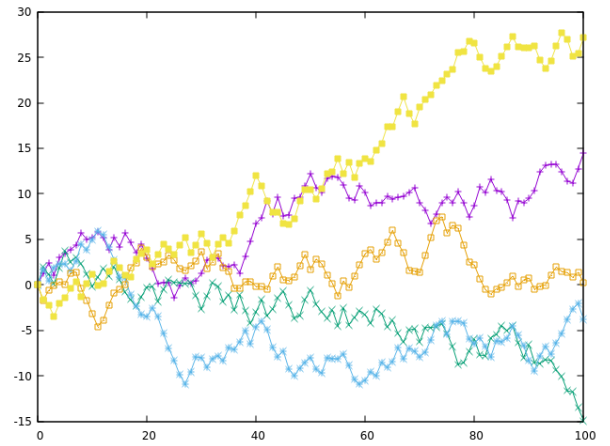
Onde $\langle X^2 \rangle$ é a média ao quadrado, N é o número de passos e $\langle \sigma^2 \rangle$ é a variância (desvio padrão ao quadrado), podemos testar a qualidade da simulação. Iremos simular um grupo de cinco caminhantes aleatórios que seguem a distribuição descrita em na equação (2).

Resultados

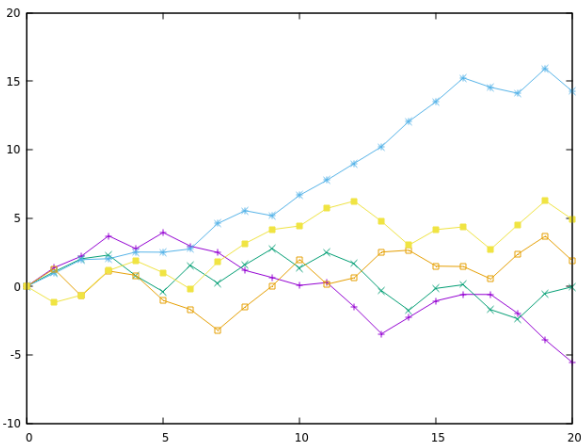
As Figuras abaixo mostram o grupo de 5 caminhantes aleatórios, onde cada um é representado por uma cor, após N passos.



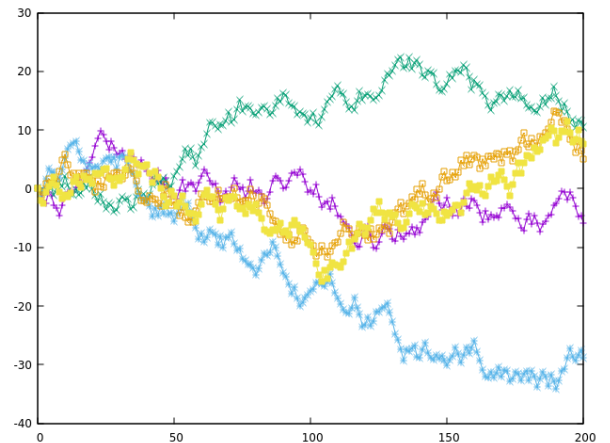
$N = 10.$



$N = 100.$



$N = 20.$



$N = 200.$

Então obtemos, utilizando das equações conhecidas de média e desvio padrão (MSD) os seguintes resultados:

Para 10 passos temos:		Para 100 passos temos:	
Camin. 1: Med. = 0.287127; MSD = 0.658264		Camin. 1: Med. = 3.192325; MSD = 0.486707	
Camin. 2: Med. = -1.712419; MSD = 0.178125		Camin. 2: Med. = 7.181120; MSD = 0.946164	
Camin. 3: Med. = -2.113454; MSD = 0.004720		Camin. 3: Med. = 3.539268; MSD = 0.505913	
Camin. 4: Med. = -2.678129; MSD = 0.068497		Camin. 4: Med. = -0.382623; MSD = 0.240891	
Camin. 5: Med. = -2.028319; MSD = 0.247008		Camin. 5: Med. = 10.180151; MSD = 1.316975	
Para 20 passos temos:		Para 200 passos temos:	
Camin. 1: Med. = 2.872605; MSD = 0.095753		Camin. 1: Med. = -0.218689; MSD = 1.185057	
Camin. 2: Med. = -1.814749; MSD = 1.577977		Camin. 2: Med. = 9.187575; MSD = 0.385385	
Camin. 3: Med. = 6.058614; MSD = 1.103675		Camin. 3: Med. = 3.703771; MSD = 0.270914	
Camin. 4: Med. = 2.611473; MSD = 0.304887		Camin. 4: Med. = -10.015983; MSD = 0.329926	
Camin. 5: Med. = -3.569008; MSD = 0.283121		Camin. 5: Med. = -5.207215; MSD = 0.714550	

Onde MSD é o desvio quadrático médio (a raiz da variância). Assim, podemos ver que a distribuição segue o esperado, o descrito pela equação (2).

Considerações Finais

Esse trabalho não foi fácil de ser realizado. O programa é extremamente complicado e ainda sim eu não tenho certeza dos resultados. Diferentemente do Caminhante Aleatório comum (o próximo trabalho) que eu tenho mais certeza.

3.4 Diversos Caminhantes Aleatórios

O Caminhante Discreto

Vamos avaliar o comportamento de caminhantes aleatórios cujos passos são 1 ou -1 , com igual possibilidade de acontecer. A Figura 1 mostra o resultado para cinco caminhantes após 100 passos, onde cada cor é um caminhante.

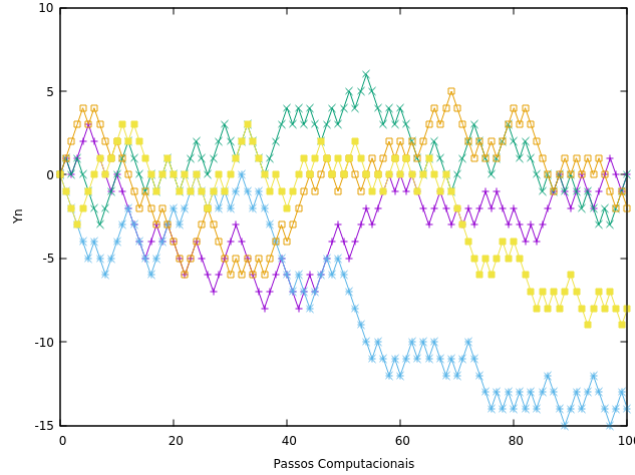


Figura 3.5: 5 caminhantes, $N = 100$

A Figura 2 mostra o MSD em função do passo para 10^4 caminhantes, em escala \log vs \log .

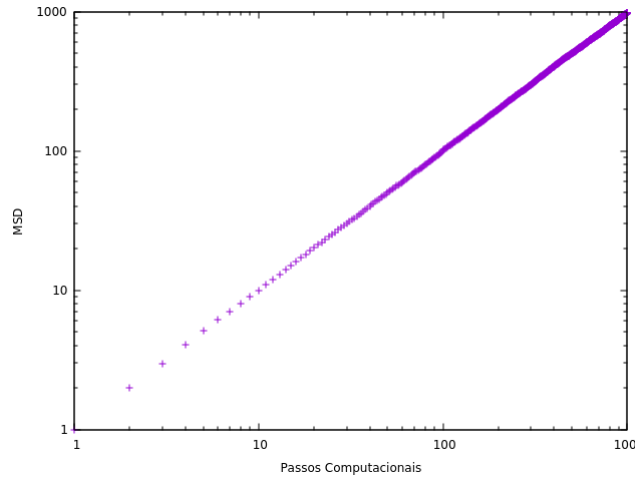


Figura 3.6: 10^4 caminhantes, $N = 10^2$.

Como esperado, o MSD é proporcional ao passo ($\text{MSD} \propto N$). Podemos visualizar também as posições finais em um histograma, como mostrado na Figura 3. Onde podemos ver um histograma para três diferentes passos finais, 100, 10^3 e 10^4 .

Caminhante Exponencial

Vamos avaliar o comportamento de caminhantes aleatórios cujos passos são dados pela seguinte função de probabilidade.

$$P(\delta) = \frac{1}{2} \exp(-\delta/2) \quad (3.6)$$

A Figura 4 mostra o resultado para cinco caminhantes após 100 passos, onde cada cor é um caminhante.

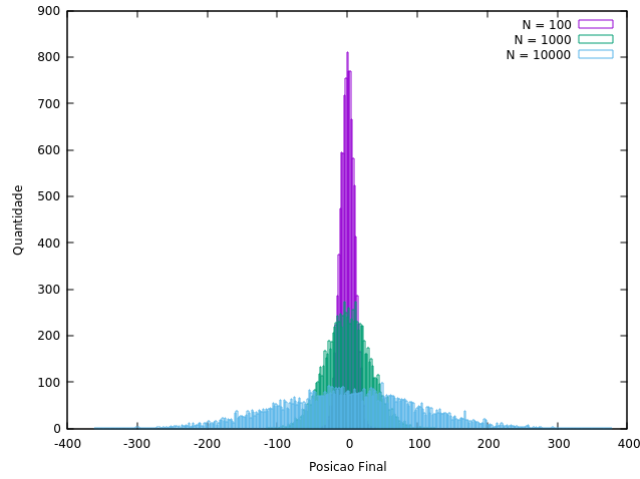


Figura 3.7: 10^4 caminhantes com $N = 100$; 10^3 ; 10^4 .

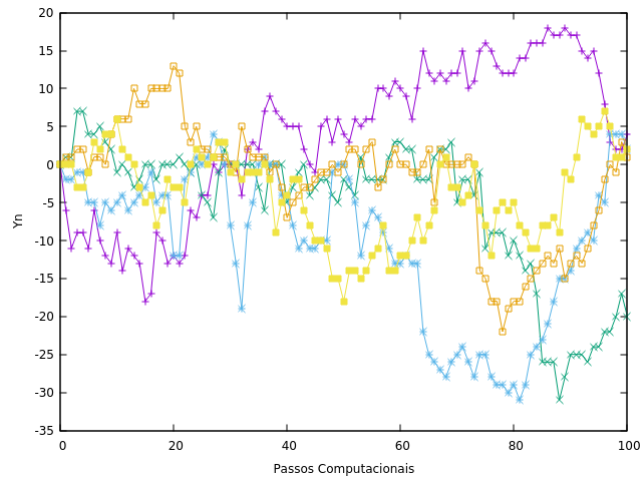


Figura 3.8: 5 caminhantes, $N = 100$.

Por algum motivo não consegui realizar o gráfico do MSD desses passos. A Figura 5 mostra o histograma para 10^4 caminhantes com diferentes N finais.

Não consigo compreender o motivo dos dois histogramas serem tão parecidos.

Caminhante de Cauchy

Vamos avaliar o comportamento de caminhantes aleatórios cujos passos são dados pela seguinte função de probabilidade.

$$P(\delta) = \frac{1}{\pi(1 + \delta^2)} \quad (3.7)$$

A Figura 6 mostra o resultado para cinco caminhantes após 100 passos, onde cada cor é um caminhante.

Considerações Finais

Meu programa funcionou muito bem para o caminhante discreto, para os outros ele dava problema na parte do MSD e/ou histograma. Muitas vezes obtive

Segmentation fault (core dumped)

e não faço ideia do por que. Envio o programa em anexo para que possa ser verificado.

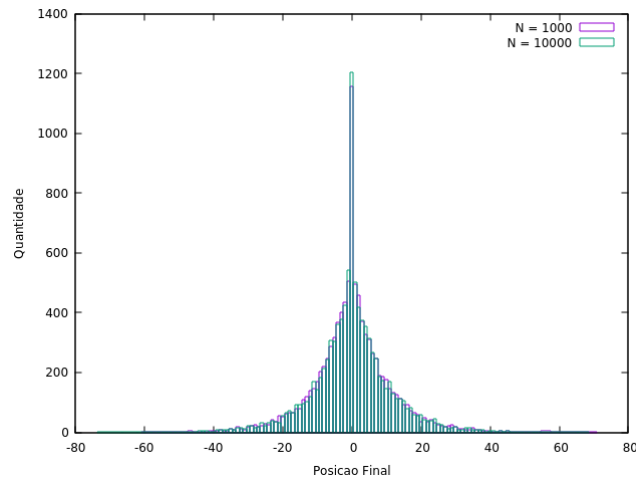


Figura 3.9: 10^4 caminhantes com 10^3 ; 10^4 .

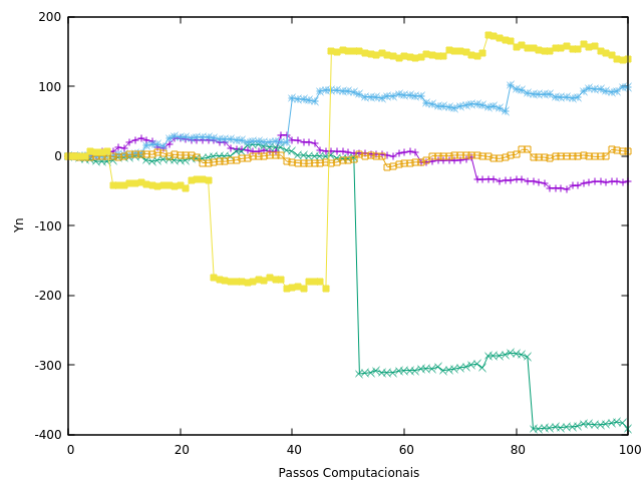


Figura 3.10: 5 caminhantes, $N = 100$.