Cálculo Numérico: uma abordagem para o ensino a distância

José Antonio Salvador e Selma H. V. Arenales

1. Teoria dos Erros em Processos Numéricos

1.1- Introdução

Nas diversas áreas científicas, diante da resolução numérica de um problema, deparamo-nos com a necessidade de tratar com soluções aproximadas, desde a interpretação do problema, a modelagem matemática correspondente, erros nos dados obtidos por meio de medidas experimentais e, implementação de dados no computador.

Para melhor entendimento, resumimos alguns passos considerados na resolução de um problema da seguinte forma:

Passos

1. Apresentação do problema real, entendimento e levantamento dos dados;
2. Formulação matemática correspondente do problema-modelo matemático;
3. Elaboração de um plano de resolução e a escolha de um método numérico adequado;
4. Implementação computacional do método, linguagem de programação;
5. Análise sobre a coerência dos resultados obtidos e o problema inicial proposto;
6. Reformular o modelo matemático e/ou escolher novo método numérico de resolução, caso o Passo 5 não esteja satisfeito.

A execução dos passos anteriores é chamada de **Validação do Modelo** e as aproximações consideradas nesses passos levam a alguns tipos de erros, conforme exemplo a seguir:

Exemplo 1.1

Considere o problema de transporte de lixo contaminado, conforme exibido na Figura 1:

Figura 1 (www.gooogle.com.br/fotos lixão - Mongaguá 04/10/2008)

Uma transportadora possui três tipos de caminhões representados por (C_1) (C_2) e (C_3) os quais são equipados para levar três tipos diferentes de materiais contaminados M_1, M_2 e M_3 para lixões adequados, conforme a Tabela 1:

	M_1	M_2	M_3
C_1	6.8	1.9	1.7
C_2	1.5	2.6	1.4
C_3	2.3	1.8	2.3

Tabela 1

O caminhão 1 (C_1) pode levar 6.8 toneladas do tipo M_1, 1.9 toneladas tipo M_2 e 1.7 toneladas tipo M_3. Deseja-se saber quantos caminhões de cada tipo devemos enviar para transportar 16 toneladas do tipo M_1, 7 toneladas do tipo M_2 e 6 toneladas do tipo M_3?

Exibiremos a execução de todos os passos citados anteriormente e faremos uma análise final dos resultados obtidos.

Passo 1

Neste passo, teremos o entendimento do problema observando todos os detalhes, características e condições intrínsecas do mesmo.

Passo 2

Neste passo, faremos a formulação matemática do problema, para isso, devemos determinar as variáveis do problema.

Assim, sejam $x_j \quad j = 1, 2, 3$ o número de caminhões a ser determinado para o transporte do lixo contaminado. Desta forma, observando a tabela de dados vemos que podemos escrever a seguinte equação para o transporte do lixo contaminado M_1:

$$6.8 x_1 + 1.5 x_2 + 2.3 x_3 = 16$$

Seguindo o mesmo raciocínio, para o transporte dos lixos contaminados M_2 e M_3, temos o seguinte sistema de equações lineares para ser resolvido, que será estudado nas próximas unidades de estudo.

$$\begin{cases} 6.8 x_1 + 1.5 x_2 + 2.3 x_3 = 16 \\ 1.9 x_1 + 2.6 x_2 + 1.8 x_3 = 7 \\ 1.7 x_1 + 1.4 x_2 + 2.3 x_3 = 6 \end{cases}$$

Passo 3

Devemos escolher o método adequado de resolução. Neste caso, vamos utilizar o Método de Eliminação de Gauss, o qual será alvo de estudo nas próximas unidades.

Passo 4

Neste passo, podemos implementar no computador o método de resolução escolhido ou utilizar um software apropriado e, teremos a solução do sistema como segue:

$x_1 = 1.9452 \quad x_2 = 0.7953 \quad x_3 = 0.6868$

Passo 5

Neste passo, temos que analisar a solução encontrada, pois o número de caminhões deverá ser um número inteiro positivo. Como temos uma solução aproximada não inteira para o sistema de equações lineares, podemos aproximá-la por um número inteiro mais próximo desta solução e, tomamos como solução $x_1 = 2.0 \quad x_2 = 1.0 \quad x_3 = 1.0$

Assim, devemos contratar dois caminhões do tipo C_1, um caminhão do tipo C_2 e um caminhão do tipo C_3.

Observações

a) Na modelagem matemática do problema, consideramos uma aproximação para o problema dado, uma vez que a capacidade de transporte de cada material em cada caminhão é estimada, isto é com uma certa margem de erro.

Alguns detalhes foram desconsiderados, como a integralidade da solução e custos envolvidos no processo de transporte.

b) A solução obtida durante a execução do método de resolução foi apresentada com uma aproximação de quatro casas decimais, o que significa que estamos cometendo erros em todas essas aproximações.

Diante das considerações anteriores sobre o tratamento dos problemas com aproximações, desde a modelagem matemática os erros cometidos durante o processamento dos métodos de resolução no computador, é necessário um entendimento geral sobre tipos de erros existentes, como descreveremos a seguir:

1.2 Erros na fase da modelagem

Devido às simplificações no processo de modelagem matemática de um problema, que muitas vezes são necessárias, podem ocorrer erros na representação do fenômeno da natureza que estivermos analisando.

Os problemas ambientais geralmente são complexos e o modelo matemático é uma aproximação do problema real, representado por expressões matemáticas, que muitas vezes, necessitam de algumas simplificações para obtermos uma solução aproximada e, portanto cometemos erros.

1.3 Erros na fase de resolução

São erros devido ao fato dos equipamentos computacionais terem capacidade limitada para armazenar os dígitos significativos de valores numéricos, utilizados nas operações elementares de adição, multiplicação, subtração, divisão, etc.

1.4 Erros na mudança da base

Considerando que a maioria dos computadores representa os valores numéricos na base binária quando são armazenados, estes são transformados em geral, da base decimal para a base binária ou em outra representação. Essa transformação pode ser acometida de erros, devido à limitação da representação do equipamento computacional que estamos utilizando para o processamento dos dados numéricos.

Dado um número real **N**, é sempre possível representá-lo em qualquer base **b**, da seguinte forma:

$N_b = \sum_{i=n}^{m} a_i b^i$, em que $a_i \in \{0,1,2,3,\ldots,(b-1)\}$, com n e m inteiros.

Exemplos 1.2

Números escritos na base 2

a) $(1011)_2 = 1*2^0 + 1*2^1 + 0*2^2 + 1*2^3$

b) $(111.01)_2 = 1*2^{-2} + 0*2^{-1} + 1*2^0 + 1*2^1 + 1*2^2$

Exemplos 1.3

Números escritos na base decimal

a) $(231)_{10} = 1*10^0 + 3*10^1 + 2*10^2$

b) $(231.35)_{10} = 5*10^{-2} + 3*10^{-1} + 1*10^0 + 3*10^1 + 2*10^2$

Mudança da base decimal para a base binária

a) Número na base decimal com somente a parte inteira.

Procedimento padrão: **Divisões sucessivas.**

Exemplo 1.4

Podemos escrever o número $(25)_{10}$ na base 2, como segue:

a) $(25)_{10} = 1*2^0 + 0*2^1 + 0*2^2 + 1*2^3 + 1*2^4 = (11001)_2$ **,** isto é:

Aplicando o processo de divisões sucessivas temos:

$\mathbf{25 \div 2 = 12 \text{ e resto} = 1 \quad , \quad 12 \div 2 = 6 \text{ e resto} = 0 \quad , \quad 6 \div 2 = 3 \text{ e resto} = 0}$

$\mathbf{3 \div 2 = 1 \text{ e resto} = 1}$

Podemos esquematizar o processo de divisões sucessivas, usando o Método da Chave, da seguinte forma:

25	2				
1	12	2			
	0	6	2		
		0	3	2	
			1	1	2
				1	0

Para obter o número 25 na base 2, basta tomar os restos das divisões sucessivas de 25 por 2, do quociente 12 por 2, e assim sucessivamente, do final para o início no esquema anterior.

Assim, escrevemos o número 25 como segue:

$25 = 1*2^0 + 0*2^1 + 0*2^2 + 1*2^3 + 1*2^4$

E, portanto temos:

$$(25)_{10} = (11001)_2$$

Definição 1.1 Erro de Arredondamento

Dizemos que um número $\bar{\mathbf{x}}$ foi arredondado na posição **n** se todos os dígitos de ordem (n+1) são desprezados da seguinte forma:

O dígito de ordem **n** é acrescido de uma unidade, se o de ordem (n+1) for maior ou igual a 5. Caso contrário o número $\bar{\mathbf{x}}$ é representado apenas com os **n** dígitos iniciais.

Exemplos 1.5

a) O número $\bar{x} = 0.123577$, usando a regra de arredondamento anterior, obtemos o número $\mathbf{x}'$ arredondado com 4 casas decimais da seguinte forma:

$$x' = 0.1236$$

b) O número $\bar{x} = 123343$, usando a regra de arredondamento anterior, obtemos o número $\mathbf{x}'$ arredondado com 3 casas decimais da seguinte forma:

$$x' = 0.123$$

Definição 1.2 Erro de Truncamento

Quando representamos uma função através de uma série infinita, o erro no valor de f(x) ao truncarmos a série após um número finito de termos é chamado de erro de truncamento.

Exemplo 1.6

a) Consideramos a representação de uma função f(x) utilizando a Série de Taylor, nas vizinhanças do ponto $\bar{x}$ como segue:

$$f(x) = f(\bar{x}) + f^{(1)}(\bar{x})\frac{(x-\bar{x})}{1!} + f^{(2)}(\bar{x})\frac{(x-\bar{x})^2}{2!} + ... + f^{(n)}(\bar{x})\frac{(x-\bar{x})^n}{n!} + ...$$

em que, $f^{(n)}(\bar{x})$ é o valor da n-ésima derivada da função f(x) no ponto $\bar{x}$.

Quando truncamos a série no 3.º termo, isto é, considerando apenas os termos até a derivada de ordem 2, na expressão acima, temos um erro cometido nesta aproximação, como segue:

$$f(x) \cong f(\bar{x}) + f^{(1)}(\bar{x})\frac{(x-\bar{x})}{1!} + f^{(2)}(\bar{x})\frac{(x-\bar{x})^2}{2!}$$

b) Consideremos o desenvolvimento da função $f(x) = e^x$ em série de Taylor, nas vizinhanças do ponto $\bar{x} = 0$, isto é:

Como, $f(x) = e^x$, $f^{(1)}(x) = e^x$, $f^{(2)}(x) = e^x$ ...

Ainda, $f(0)=1,\ f^{(1)}(0)=1,\ f^{(2)}(0)=1$ ... temos que:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \ldots + \frac{x^n}{n!} + \ldots,$$

Considerando apenas os quatro primeiros termos da série temos:

$$e^x \cong 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} = \frac{1}{6}\left(x^3 + 3.x^2 + 6x + 6\right)$$

Para $x = 2$, temos $\mathbf{e}^2 = 6.33333$, que é um valor com erro absoluto bem significativo, quando comparado com o valor $\mathbf{e}^2 = 7.38906$ obtido numa calculadora científica que armazena uma quantidade maior de termos da série.

Definição 1.3 Erro Absoluto

Quando substituímos uma solução exata $\bar{\mathbf{x}}$ de um problema por uma solução aproximada $\mathbf{x}'$, cometemos um erro chamado Erro Absoluto:

$$E_a = \left|\ \bar{x} - x'\ \right|$$

Definição 1.4 Erro Relativo

Quando consideramos o Erro Absoluto cometido em relação a uma grandeza numérica, chamamos de Erro Relativo:

$$E_r = \frac{\left|\bar{x} - x'\right|}{\left|\bar{x}\right|}$$

Exemplos 1.7

a) Consideremos o valor exato $\bar{x} = 2345.713$ e o valor aproximado $x' = 2345.000$

Neste caso temos:

$$E_a = \left|2345.713 - 2345.000\right| = 0.713 \quad \text{e}$$

$$E_r = \frac{\left|E_a\right|}{\left|\bar{x}\right|} = \frac{0.713}{2345.713} = 0.00030396$$

b) Consideremos o valor exato $\bar{x} = 1.713$ e o valor aproximado $x' = 1.000$

Então,

$$E_a = \left|1.713 - 1.000\right| = 0.713 \quad \text{e} \quad E_r = \frac{\left|E_a\right|}{\left|\bar{x}\right|} = \frac{0.713}{1.713} = 0.416229$$

Observe que nos exemplos anteriores a) e b) o erro absoluto é o mesmo, embora o erro cometido pela aproximação seja muito mais significativo no exemplo b). No exemplo a) o erro relativo é da ordem de 0.03% enquanto que no exemplo b) é da ordem de 41,6%.

Exemplo 1.8

Considere a distâncias entre as cidades:

a) São Carlos à Campinas -170 km

b) São Carlos à Ibaté - 20 km

Ao ser perguntado, qual a distância no item a) e b) uma pessoa informa como a seguir:

a) São Carlos à Campinas -160 km

b) São Carlos à Ibaté- 10 km

Qual o erro cometido nessas informações?

$$E_a = |170 - 160| = 10 \text{ em a)}$$

$$E_a = |20 - 10| = 10 \text{ em b)}$$

$$E_r = \frac{|E_a|}{|170|} = \frac{10}{170} \quad \text{em a)}$$

$$E_r = \frac{|E_a|}{|20|} = \frac{10}{20} = \frac{1}{2} \quad \text{em b)}$$

Podemos concluir que o Erro Absoluto em a) ou b) é o mesmo, não fornecendo informações significativas sobre o quanto estamos errando naquela informação.

O Erro Relativo nos informa que errar 10 em 170, não foi cometido um erro muito grande na informação, pois, 10/170 ≈ 0.0588 = 5.88%, mas errar 10 em 20, foi cometido um erro de 10/20 = 0.5 = 50% na informação.

Podemos concluir que o erro relativo nos fornece mais informações sobre a qualidade do erro que estamos cometendo num determinado cálculo, uma vez que no erro absoluto não é levada em consideração a ordem de grandeza do valor calculado, enquanto que no erro relativo esta ordem é contemplada.

1.5 Erro Absoluto e Erro Relativo nos procedimentos numéricos

Como utilizar as definições de Erro Absoluto e Erro Relativo?

Sabemos que nos procedimentos numéricos em geral, quando resolvemos um problema, geramos uma sequência de soluções aproximadas $x_0, x_1, ..., x_k, x_{k+1} ...... \bar{x}$.

Se esta sequência for convergente para a solução $\bar{x}$, na medida em que k cresce, $k \to \infty$, as soluções aproximadas $x_k \; e \; x_{k+1}$ tendem a ficar próximas.

As definições de E_a e E_r definidas anteriormente serão usadas para medir o quão próximas estão às soluções x_k e x_{k+1} e dessa forma podemos interromper a sequência x_k gerada, utilizando um **Critério de Parada**, com Erro Absoluto ou o Erro Relativo como segue:

Dada uma tolerância por um número $\varepsilon > 0$, suficientemente pequeno, consideramos que:

$$E_a = | x_{k+1} - x_k | < \varepsilon$$

e,

$$E_r = \frac{| x_{k+1} - x_k |}{| x_{k+1} |} < \varepsilon$$

Caso E_a ou E_r seja menor do que o número □, entendemos que a soluções x_k e x_{k+1} estão próximas e podemos interromper a sequência tomando o último valor calculado como a solução aproximada do problema.

Exemplo 1.9

Podemos resolver a equação x^2-2=0 utilizando o processo iterativo $x_{k+1} = \frac{1}{2}(x_k + \frac{2}{x_k}) \; k = 1,2....$. Na medida em que variamos k = 1,2... geramos uma a sequência de soluções aproximadas $x_0, x_1 ...$ que converge para $\bar{x} = \sqrt{2} \cong 1.414213562$.

Para uma tolerância dada $\varepsilon = 0.0001$ e $x_0 = 1$ uma solução inicial, temos a sequência de soluções aproximadas convergente para a solução $\bar{x} = \sqrt{2}$, gerada pelo processo iterativo, isto é:

Tomando $x_0 = 1$, uma solução inicial qualquer,
e no processo iterativo dado, variando $k = 1, 2...$ temos:

$$\text{Para } k = 0 \rightarrow x_1 = 1.50000 \rightarrow \frac{|x_1 - x_0|}{|x_1|} = 0.33333 > \varepsilon$$

$$\text{Para } k = 1 \rightarrow x_2 = 1.41667 \rightarrow \frac{|x_2 - x_1|}{|x_2|} = 0.05882 > \varepsilon$$

$$\text{Para } k = 2 \rightarrow x_3 = 1.41422 \rightarrow \frac{|x_3 - x_2|}{|x_3|} = 0.00173 > \varepsilon$$

$$\text{Para } k = 3 \rightarrow x_4 = 1.41421 \rightarrow \frac{|x_4 - x_3|}{|x_4|} = 0.00001 < \varepsilon$$

Desta forma, usando o Erro Relativo como o Critério de Parada, e uma vez que, este está satisfeito na sequência quando k = 3, temos que a solução $\overline{x} \cong x_4 = 1.41421$.

Nota:

Podemos ainda considerar ainda os erros de representação, que em geral, são utilizados nos computadores para representação dos números, chamado de ponto flutuante.

A união de todos os números na representação em ponto flutuante é chamado de Sistema de Ponto Flutuante. Detalhes sobre este tópico estão na na Referência Bibliográfica [1].

1.6 Propagação dos erros

A propagação dos erros pode ser observada quando utilizamos um processo numérico para buscar a solução de um determinado problema. Este processamento envolve um número muito grande de operações elementares e os erros acumulados no final dos processos numéricos interferem na qualidade da solução aproximada do problema.

1.7 Mapa Conceitual

Um Mapa Conceitual é um instrumento utilizado no processo de ensino, aprendizagem e avaliação por meio de uma representação gráfica de um conjunto de significados conceituais, o qual pode vir acompanhado de um pequeno texto explicativo símbolos que ajudam organizar, sistematizar, estudar e detectar as idéias principais do tópico abordado.

Por exemplo, apresentamos a seguir um **Mapa Conceitual** preliminar sobre os erros em processos numéricos.