

Licença

Este trabalho está licenciado sob a Licença Creative Commons Atribuição-CompartilhaIgual 3.0 Não Adaptada. Para ver uma cópia desta licença, visite https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/ ou envie uma carta para Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

Contents

Capa					
Li	cenç	a	ii		
Sı	ımár	io	iv		
1	Inti	rodução	1		
2	Rep	presentação de números e aritmética de máquina	3		
	2.1	Sistema de numeração e mudança de base	3		
	2.2	Notação científica e notação normalizada	11		
	2.3	Representação decimal finita	12		
		2.3.1 Arredondamento de números	13		
	2.4	Representação de números em máquina	16		
		2.4.1 Números inteiros	16		
		2.4.2 Sistema de ponto fixo	19		
		2.4.3 Sistema de ponto flutuante	20		
		2.4.4 Precisão e épsilon de máquina	23		
		2.4.5 Distribuição dos números			
	2.5	Tipos de erros	26		
	2.6	Erros nas operações elementares	30		
	2.7	Cancelamento catastrófico	31		
	2.8	Condicionamento de um problema	34		
	2.9	Exemplos selecionados de cancelamento catastrófico	39		
3	Inte	erpolação	49		
	3.1	Interpolação polinomial	50		
	3.2	Diferenças divididas de Newton	55		
	3.3	Polinômios de Lagrange	57		
	3.4	Aproximação de funções reais por polinômios interpoladores	58		
	3.5	Interpolação linear segmentada	62		

	3.6	Interpo	olação cúbica segmentada - spline	63
		3.6.1	Spline natural	
		3.6.2	Spline fixado	
		3.6.3	Spline not-a-knot	
		3.6.4	Spline periódico	
		0.0.2	Participant of the second of t	, –
\mathbf{A}	Ráp	ida int	trodução à linguagem Julia	73
	A.1	Sobre a	a linguagem Julia	73
		A.1.1	Características Principais	74
		A.1.2	Instalação e execução	
		A.1.3	Usando Julia	
	A.2	Elemei	ntos da linguagem	
			Variáveis	
	A.3		itórios	
	A.4	Estrut	uras de ramificação e repetição	78
		A.4.1	A instrução de ramificação "if"	78
		A.4.2	A instrução de repetição "for"	79
		A.4.3	A instrução de repetição "while"	
	A.5	Funçõe	es	
		A.5.1	Operações matemáticas elementares	
		A.5.2	Funções e constantes elementares	
		A.5.3	Operadores lógicos	
	A.6	Matriz	es	
		A.6.1	Obtendo dados de uma matriz	
		A.6.2	Operações matriciais e elemento-a-elemento	
	A.7		08	
		STATIO		
Re	espos	tas do	s Exercícios	87

iv

Chapter 1

Introdução

Cálculo numérico é a disciplina que estuda as técnicas para a solução aproximada de problemas matemáticos. Estas técnicas são de natureza analítica e computacional. As principais preocupações normalmente envolvem exatidão e desempenho.

Aliado ao aumento contínuo da capacidade de computação disponível, o desenvolvimento de métodos numéricos tornou a simulação computacional de problemas matemáticos uma prática usual nas mais diversas áreas científicas e tecnológicas. As então chamadas simulações numéricas são constituídas de um arranjo de vários esquemas numéricos dedicados a resolver problemas específicos como, por exemplo: resolver equações algébricas, resolver sistemas de equações lineares, interpolar e ajustar pontos, calcular derivadas e integrais, resolver equações diferenciais ordinárias etc. Neste livro, abordamos o desenvolvimento, a implementação, a utilização e os aspectos teóricos de métodos numéricos para a resolução desses problemas.

Trabalharemos com problemas que abordam aspectos teóricos e de utilização dos métodos estudados, bem como com problemas de interesse na engenharia, na física e na matemática aplicada.

A necessidade de aplicar aproximações numéricas decorre do fato de que esses problemas podem se mostrar intratáveis se dispomos apenas de meios puramente analíticos, como aqueles estudados nos cursos de cálculo e álgebra linear. Por exemplo, o teorema de Abel-Ruffini nos garante que não existe uma fórmula algébrica, isto é, envolvendo apenas operações aritméticas e radicais, para calcular as raízes de uma equação polinomial de qualquer grau, mas apenas casos particulares:

- Simplesmente isolar a incógnita para encontrar a raiz de uma equação do primeiro grau;
- Fórmula de Bhaskara para encontrar raízes de uma equação do segundo grau;
- Fórmula de Cardano para encontrar raízes de uma equação do terceiro grau;
- Existe expressão para equações de quarto grau;

• Casos simplificados de equações de grau maior que 4 onde alguns coeficientes são nulos também podem ser resolvidos.

Equações não polinomiais podem ser ainda mais complicadas de resolver exatamente, por exemplo:

$$\cos(x) = x \qquad \text{ou} \qquad xe^x = 10 \tag{1.1}$$

A maioria dos problemas envolvendo fenômenos reais produzem modelos matemáticos cuja solução analítica é difícil (ou impossível) de obter, mesmo quando provamos que a solução existe. Nesse curso propomos calcular aproximações numéricas para esses problemas, que apesar de, em geral, serem diferentes da solução exata, mostraremos que elas podem ser bem próximas.

Para entender a construção de aproximações é necessário estudar como funciona a aritmética implementada nos computadores e erros de arredondamento. Como computadores, em geral, usam uma base binária para representar números, começaremos falando em mudança de base.

Chapter 2

Representação de números e aritmética de máquina

Neste capítulo, abordaremos formas de representar números reais em computadores. Iniciamos com uma discussão sobre representação posicional e mudança de base. Então, enfatizaremos a representação de números com quantidade finita de dígitos, mais especificamente, as representações de números inteiros, ponto fixo e ponto flutuante em computadores.

A representação de números e a aritmética em computadores levam aos chamados erros de arredondamento e de truncamento. Ao final deste capítulo, abordaremos os efeitos do erro de arredondamento na computação científica.

2.1 Sistema de numeração e mudança de base

Usualmente, utilizamos o sistema de numeração decimal, isto é, base 10, para representar números. Esse é um sistema de numeração em que a posição do algarismo indica a potência de 10 pela qual seu valor é multiplicado.

Exemplo 2.1.1. O número 293 é decomposto como

$$293 = 2 \text{ centenas} + 9 \text{ dezenas} + 3 \text{ unidades}$$

= $2 \cdot 10^2 + 9 \cdot 10^1 + 3 \cdot 10^0$. (2.1)

O sistema de numeração posicional também pode ser usado com outras bases. Vejamos a seguinte definição.

Definição 2.1.1 (Sistema de numeração de base b). Dado um número natural b > 1 e o conjunto de símbolos $\{\pm, 0, 1, 2, \dots, b-1\}^1$, a sequência de símbolos

$$(d_n d_{n-1} \cdots d_1 d_0, d_{-1} d_{-2} \cdots)_b \tag{2.2}$$

 $^{^{1}}$ Para b > 10, veja a Observação 2.1.1.

representa o número positivo

$$d_n \cdot b^n + d_{n-1} \cdot b^{n-1} + \dots + d_0 \cdot b^0 + d_{-1} \cdot b^{-1} + d_{-2} \cdot b^{-2} + \dots$$
 (2.3)

Para representar números negativos usamos o símbolo - à esquerda do numera l^2 .

Observação 2.1.1 ($b \ge 10$). Para sistemas de numeração com base $b \ge 10$ é usual utilizar as seguintes notações:

• No sistema de numeração decimal (b = 10), costumamos representar o número sem os parênteses e o subíndice, ou seja,

$$\pm d_n d_{n-1} \dots d_1 d_0, d_{-1} d_{-2} \dots := \pm (d_n d_{n-1} \dots d_1 d_0, d_{-1} d_{-2} \dots)_{10}. \tag{2.4}$$

• Se b > 10, usamos as letras A, B, C, \cdots para denotar os algarismos: A = 10, B = 11, C = 12, D = 13, E = 14, F = 15.

Exemplo 2.1.2 (Sistema binário). O sistema de numeração em base dois é chamado de binário e os algarismos binários são conhecidos como *bits* (do inglês **binary digits**). Um *bit* pode assumir dois valores distintos: 0 ou 1. Por exemplo:

$$x = (1001,101)_{2}$$

$$= 1 \cdot 2^{3} + 0 \cdot 2^{2} + 0 \cdot 2^{1} + 1 \cdot 2^{0} + 1 \cdot 2^{-1} + 0 \cdot 2^{-2} + 1 \cdot 2^{-3}$$

$$= 8 + 0 + 0 + 1 + 0.5 + 0 + 0.125 = 9.625.$$
(2.5)

Ou seja, $(1001,101)_2$ é igual a 9,625 no sistema decimal.

Em Julia podemos converter o número (1001,101)₂ para a base decimal computando

Exemplo 2.1.3 (Sistema quaternário). No sistema quaternário a base b é igual a 4 e, portanto, temos o seguinte conjunto de algarismos $\{0, 1, 2, 3\}$. Por exemplo:

$$(301,2)_4 = 3 \cdot 4^2 + 0 \cdot 4^1 + 1 \cdot 4^0 + 2 \cdot 4^{-1} = 49,5.$$
 (2.6)

Verifique no computador!

Exemplo 2.1.4 (Sistema octal). No sistema octal a base é b = 8. Por exemplo:

$$(1357,24)_8 = 1 \cdot 8^3 + 3 \cdot 8^2 + 5 \cdot 8^1 + 7 \cdot 8^0 + 2 \cdot 8^{-1} + 4 \cdot 8^{-2}$$

= 512 + 192 + 40 + 7 + 0.25 + 0.0625 = 751,3125. (2.7)

Verifique no computador!

²O uso do símbolo + é opcional na representação de números positivos.

Exemplo 2.1.5 (Sistema hexadecimal). O sistema de numeração cuja base é b = 16 é chamado de sistema hexadecimal. Neste, temos o conjunto de algarismos $\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, A, B, C, D, E, F\}$. Convertendo o número $(E2AC)_{16}$ para a base 10 temos

$$(E2AC)_{16} = 14 \cdot 16^{3} + 2 \cdot 16^{2} + 10 \cdot 16^{1} + 12 \cdot 16^{0}$$

= 57344 + 512 + 160 + 12 = 58028. (2.8)

Verifique no computador!

Observação 2.1.2. A linguagem Julia tem prefixos para representar números nas bases 2, 8 e 10. Por exemplo, temos:

```
>>> print(0b1001) # bin -> dec
9
>>> print(0o157) # oct -> dec
111
>>> print(0xbeba) # hex -> dec
48826
>>> string(9,base=2) # dec -> bin
1001
```

Também é possível usar a função int() para interpretar a representação de um inteiro em uma base com b entre 2 e 36. Por exemplo, temos:

```
>>> print(int('1001', 2)) # Base 2
9
>>> print(int('1001', 5)) # Base 5
126
>>> print(int('ABCD', 20)) # Base 20
84653
>>> print(int('zz', 36)) # Base 36
1295
```

Nos exemplos acima vimos como converter números representados em um sistema de numeração de base b para o sistema decimal. Agora, vamos estudar como fazer o processo inverso. Isto é, dado um número decimal $(X)_{10}$ queremos escrevê-lo em uma outra base b, isto é, queremos obter a seguinte representação:

$$(X)_{10} = (d_n d_{n-1} \cdots d_0, d_{-1} \cdots)_b$$

= $d_n \cdot b^n + d_{n-1} \cdot b^{n-1} + \cdots + d_0 \cdot b^0 + d_{-1} \cdot b^{-1} + d_{-2} \cdot b^{-2} + \cdots$ (2.9)

Separando as partes inteira e fracionária de X, isto é, $X = X^{i} + X^{f}$, temos

$$X^{\dot{1}} = d_n \cdot b^n + \dots + d_{n-1}b^{n-1} + \dots + d_1 \cdot b^1 + d_0 \cdot b^0$$
 (2.10)

e

$$X^{f} = \frac{d_{-1}}{b^{1}} + \frac{d_{-2}}{b^{2}} + \cdots$$
 (2.11)

Nosso objetivo é determinar os algarismos $\{d_n, d_{n-1}, ...\}$.

Primeiramente, vejamos como tratar a parte inteira X^1 . Calculando o quociente de X^1 por b, temos:

$$\frac{X^{\mathbf{i}}}{b} = \frac{d_0}{b} + d_1 + d_2 \cdot b^1 + \dots + d_{n-1} \cdot b^{n-2} + d_n \cdot b^{n-1}. \tag{2.12}$$

Observe que d_0 é o resto da divisão de X^1 por b, pois $d_1 + d_2 \cdot b^1 + \cdots + d_{n-1} \cdot b^{n-2} + d_n \cdot b^{n-1}$ é inteiro e $\frac{d_0}{b}$ é uma fração com $d_0 < b$. Da mesma forma, o resto da divisão de $d_1 + d_2 \cdot b^1 + \cdots + d_{n-1} \cdot b^{n-2} + d_n \cdot b^{n-1}$ por b é d_1 . Ou seja, repetindo este processo encontramos os algarismos $d_0, d_1, d_2, \ldots, d_n$.

Vamos, agora, converter a parte fracionária X^{f} do número decimal X para o sistema de base b. Multiplicando X^{f} por b, temos

$$bX^{f} = d_{-1} + \frac{d_{-2}}{b} + \frac{d_{-3}}{b^{2}} + \cdots$$
 (2.13)

Observe que a parte inteira desse produto é d_{-1} e $\frac{d_{-2}}{b} + \frac{d_{-3}}{b^2} + \cdots$ é a parte fracionária. Quando multiplicamos $\frac{d_{-2}}{b} + \frac{d_{-3}}{b^2} + \cdots$ por b novamente, encontramos d_{-2} . Repetindo este processo encontramos os demais algarismos.

Exemplo 2.1.6. Vamos converter o número 9,625 para a base binária (b = 2). Primeiramente, decompomos 9,625 na soma de suas partes inteira e fracionária.

$$9,625 = 9 + 0,625. \tag{2.14}$$

Conversão da parte inteira. Para converter a parte inteira, fazemos sucessivas divisões por b=2 obtendo

$$9 = 4 \cdot 2 + 1 \tag{2.15}$$

$$= (2 \cdot 2 + 0) \cdot 2 + 1 \tag{2.16}$$

$$= 2^3 + 1. (2.17)$$

Ou seja, temos que $9 = (1001)_2$.

Em Julia, podemos usar os comandos int (truncamento) e a operação % (resto da divisão) para computar esta conversão da seguinte forma

```
1 >>> x = 9
2 >>> d0 = x%2; x = int(x/2); print(f"d0 = {d0}, x = {x}")
3 d0 = 1, x = 4
```

```
4 >>> d1 = x%2; x = int(x/2); print(f"d1 = {d1}, x = {x}")
5 d1 = 0, x = 2
6 >>> d2 = x%2; x = int(x/2); print(f"d2 = {d2}, x = {x}")
7 d2 = 0, x = 1
8 >>> d3 = x%2; x = int(x/2); print(f"d3 = {d3}, x = {x}")
9 d3 = 1, x = 0
```

Conversão da parte fracionária. Para converter a parte fracionária, fazemos sucessivas multiplicações por b=2 obtendo

$$0,625 = 1,25 \cdot 2^{-1} = 1 \cdot 2^{-1} + 0,25 \cdot 2^{-1}$$

$$= 1 \cdot 2^{-1} + (0,5 \cdot 2^{-1}) \cdot 2^{-1} = 1 \cdot 2^{-1} + 0,5 \cdot 2^{-2}$$

$$= 1 \cdot 2^{-1} + (1 \cdot 2^{-1}) \cdot 2^{-2} = 1 \cdot 2^{-1} + 1 \cdot 2^{-3}.$$

$$(2.18)$$

$$(2.19)$$

Ou seja, temos que $0.625 = (0.101)_2$.

No GNU Octave, podemos computar esta conversão da parte fracionária da seguinte forma

```
>> x = 0.625

x = 0.62500

>> d = fix(2*x), x = 2*x - d

d = 1

x = 0.25000

>> d = fix(2*x), x = 2*x - d

d = 0

x = 0.50000

>> d = fix(2*x), x = 2*x - d

d = 1

x = 0
```

Conclusão. Da conversão das partes inteira e fracionária de 9,625, obtemos $9 = (1001)_2$ e $0,625 = (0,101)_2$. Logo, concluímos que $9,625 = (1001,101)_2$.

Observação 2.1.3. O GNU Octave oferece algumas funções para a conversão de números inteiros em base decimal para uma base dada. Por exemplo, temos:

```
>> dec2base(9,2)
ans = 1001
>> dec2base(111,8)
ans = 157
>> dec2base(48826,16)
ans = BEBA
```

Observação 2.1.4. Uma maneira de converter um número dado em uma base b_1 para uma base b_2 é fazer em duas partes: primeiro converter o número dado na base b_1 para base decimal e depois converter para a base b_2 .

Exercícios resolvidos

Esta seção carece de exercícios resolvidos. Participe da sua escrita.

Veja como em:

https://github.com/livroscolaborativos/CalculoNumerico

ER 2.1.1. Obtenha a representação do número 125,583 na base 6.

Solução. Decompomos 125,583 nas suas partes inteira 125 e fracionária 0,583. Então, convertemos cada parte.

Conversão da parte inteira. Vamos escrever o número 125 na base 6. Para tanto, fazemos sucessivas divisões por 6 como segue:

$$125 = 20 \cdot 6 + 5 \quad (125 \text{ dividido por } 6 \text{ \'e igual a } 20 \text{ e resta } 5)$$

= $(3 \cdot 6 + 2) \cdot 6 + 5 = 3 \cdot 6^2 + 2 \cdot 6 + 5,$ (2.21)

logo $125 = (325)_6$.

Estes cálculos podem ser feitos no GNU Octave com o auxílio das funções mod e fix. A primeira calcula o resto da divisão entre dois números, enquanto que a segunda retorna a parte inteira de um número dado. No nosso exemplo, temos:

Verifique!

Conversão da parte fracionária. Para converter 0,583 para a base 6, fazemos sucessivas multiplicações por 6 como segue:

$$0.58\overline{3} = 3.5 \cdot 6^{-1} \quad (0.58\overline{3} \text{ multiplicado por 6 \'e igual a } 3.5)$$

$$= 3 \cdot 6^{-1} + 0.5 \cdot 6^{-1}$$

$$= 3 \cdot 6^{-1} + (3 \cdot 6^{-1}) \cdot 6^{-1}$$

$$= 3 \cdot 6^{-1} + 3 \cdot 6^{-2},$$

$$(2.22)$$

 \Diamond

 $\log 0.58\overline{3} = (0.33)_6.$

No GNU Octave, podemos computar esta conversão da parte fracionária da seguinte forma

>>
$$x = 0.58 + 1/3/100$$

 $x = 0.58333$
>> $d = fix(6*x), x = 6*x - d$
 $d = 3$
 $x = 0.50000$
>> $x = 0.5 \#isso \ \'e realmente necess\'ario?$
 $x = 0.50000$
>> $d = fix(6*x), x = 6*x - d$

d = 3

x = 0

ER 2.1.2. Obtenha a representação na base 4 do número $(101,01)_2$.

Solução. Começamos convertendo $(101,01)_2$ para a base decimal:

$$(101,01)_2 = 1 \cdot 2^2 + 1 \cdot 2^0 + 1 \cdot 2^{-2} = 5,25. \tag{2.23}$$

Então, convertemos 5,25 para a base 4. Para sua parte inteira, temos

$$5 = 1 \cdot 4 + 1 = (11)_4. \tag{2.24}$$

Para sua parte fracionária, temos

$$0.25 = 1 \cdot 4^{-1} = (0.1)_4. \tag{2.25}$$

Logo, $(101,01)_2 = (11,1)_4$. Verifique estas contas no computador!

Exercícios

E 2.1.1. Converta para base decimal cada um dos seguintes números:

- a) $(100)_2$
- b) $(100)_3$
- c) $(100)_b$
- d) $(12)_5$

- e) $(AA)_{16}$
- f) $(7,1)_8$
- g) $(3,12)_5$

E 2.1.2. Escreva os números abaixo na base decimal.

- a) $(25,13)_8$
- b) $(101,1)_2$
- c) $(12F,4)_{16}$
- d) $(11,2)_3$
 - E 2.1.3. Escreva o número 5,5 em base binária.
 - **E 2.1.4.** Escreva o número 17,109375 em base hexadecimal (b = 16).
 - **E 2.1.5.** Escreva cada número decimal na base b.
- a) $7,\overline{6}$ na base b=5
- b) $29,1\overline{6}$ na base b=6
 - **E 2.1.6.** Escreva $(12.4)_8$ em base decimal e binária.
 - **E 2.1.7.** Escreva cada número dado para a base b.
- a) $(45,1)_8$ para a base b=2
- b) $(21,2)_8$ para a base b = 16
- c) $(1001,101)_2$ para a base b=8
- d) $(1001,101)_2$ para a base b=16
- **E 2.1.8.** Quantos algarismos são necessários para representar o número 937163832173947 em base binária? E em base 7? Dica: Qual é o menor e o maior inteiro que pode ser escrito em dada base com N algarismos?

2.2 Notação científica e notação normalizada

Como vimos, no sistema posicional usual um número x na base b é representado por

$$x = \pm (d_n d_{n-1} \cdots d_0, d_{-1} d_{-2} d_{-3} \cdots)_b, \tag{2.26}$$

onde $d_n \neq 0$ e $d_i \in \{0, 1, \dots, b-1\}$ é o dígito da *i*-ésima posição. Alternativamente, é costumeiro usarmos a chamada notação científica. Nesta, o número x é representado como

$$x = \pm (M)_b \times b^e, \tag{2.27}$$

onde $(M)_b = (d_m d_{m-1} \cdots d_0, d_{-1} d_{-2} d_{-3} \cdots)_b$ é chamada de mantissa e $e \in \mathbb{Z}$ é chamado de expoente de x.

Exemplo 2.2.1. a) O número 602,2141 em notação científica pode ser escrito como

$$602,2141 \times 10^0 = 60,22141 \times 10^1 = 0,6022141 \times 10^3.$$
 (2.28)

b) O número $(1010,10)_2$ pode ser escrito em notação científica como $(10,1010)_2 \times 2^2$.

Observamos que um número pode ser representado de várias formas equivalentes em notação científica. Para termos uma representação única introduzimos o conceito de notação normalizada.

Definição 2.2.1. Um número x na base b é dito estar representado em notação (científica) normalizada quando está escrito na forma

$$x = (-1)^s (M)_b \times b^E, (2.29)$$

onde $(M)_b = (d_0, d_{-1}d_{-2}d_{-3}\cdots)_b$, com $d_0 \neq 0^{34}$, s é 0 para positivo e 1 para negativo, E é o expoente.

Exemplo 2.2.2. Vejamos os seguintes casos:

- a) O número 602,2141 em notação (científica) normalizada é representado por 6.022141×10^2 .
- b) O número $(1010,10)_2$ escrito em notação normalizada é $(1,01010)_2 \times 2^3$.

Observação 2.2.1. No GNU Octave, podemos controlar a impressão de números usando o comando printf. Por exemplo:

³Em algumas referências é usado $M_b = (0, d_{-1}d_{-2}d_{-3}\cdots)_b$.

⁴No caso de x = 0, $M_b = (0.00 \cdots)_b$.

```
>> printf('%1.5f\n',-pi)
-3.14159
>> printf('%1.5e\n',-pi)
-3.14159e+00
```

No primeiro caso, obtemos a representação em ponto flutuante decimal com 6 dígitos do número $-\pi$. No segundo caso, obtemos a representação em notação científica normalizada com 6 dígitos.

Exercícios resolvidos

Esta seção carece de exercícios resolvidos. Participe da sua escrita.

Veja como em:

https://github.com/livroscolaborativos/CalculoNumerico

Exercícios

Esta seção carece de exercícios. Participe da sua escrita.

Veja como em:

https://github.com/livroscolaborativos/CalculoNumerico

E 2.2.1. Represente os seguintes números em notação científica normalizada:

a)
$$299792,458$$
 b) $66,2607 \times 10^{-35}$
c) $0,6674 \times 10^{-7}$ d) $9806,65 \times 10^{1}$ (2.30)

E 2.2.2. Use o computador para verificar as respostas do Exercício 2.2.1.

2.3 Representação decimal finita

Em computadores, é usual representarmos números usando uma quantidade de dígitos finita. A quantidade a ser usada normalmente depende da precisão com que as computações estão sendo feitas. Ocorre que quando restringimos a representação a um número finito de dígitos, muitos números não podem ser representado de forma exata, por exemplo, as dízimas infinitas e os números irracionais. Este fenômeno nos leva aos conceitos de número de dígitos significativos e de arredondamento.

Definição 2.3.1 (Número de dígitos significativos). Um número decimal $x = \pm d_0, d_{-1} \cdots d_{-i} d_{-i-1} \cdots d_{-i-n} d_{-i-n-1} \cdot \times 10^E$ é dito ter n dígitos significativos quando $d_j = 0$ para $j \ge -i$ e $j \le -i - n - 1$.

Exemplo 2.3.1. O número 0.0602100×10^{-3} tem 4 dígitos significativos.

2.3.1 Arredondamento de números

Quando representamos um número x com uma quantidade de dígitos menor que a de dígitos significativos acabamos com uma aproximação deste. Este procedimento é chamado arredondamento de um número. Mais precisamente, seja dado

$$x = \pm d_0, d_1 d_2 \dots d_{k-1} d_k d_{k+1} \dots d_n \times 10^e$$
(2.33)

em notação normalizada, isto é, $d_0 \neq 0^5$. Podemos representar x com k dígitos da seguinte forma:

1. Arredondamento por truncamento (ou corte): aproximamos x por

$$\bar{x} = \pm d_0, d_1 d_2 \dots d_k \times 10^e$$
 (2.34)

simplesmente descartando os dígitos d_j com j > k.

2. Arredondamento por proximidade⁶: se $d_{k+1} < 5$ aproximamos x por

$$\bar{x} = \pm d_0, d_1 d_2 \dots d_k \times 10^e$$
 (2.35)

senão aproximamos x por⁷

$$\bar{x} = \pm (d_0, d_1 d_2 \dots d_k + 10^{-k}) \times 10^e$$
 (2.37)

3. Arredondamento por proximidade com desempate par: se $d_{k+1} < 5$ aproximamos x por

$$\bar{x} = \pm d_0, d_1 d_2 \dots d_k \times 10^e.$$
 (2.38)

Se $d_{k+1}, d_{d+2}d_{k+3} \dots > 5$ aproximamos x por

$$\bar{x} = \pm (d_0, d_1 d_2 \dots d_k + 10^{-k}) \times 10^e.$$
 (2.39)

$$\pm (d_0, d_1 d_2 \dots d_k d_{k+1} + 5 \times 10^{-(k+1)}) \times 10^e$$
 (2.36)

 $^{^5}$ caso $x \neq 0$.

⁶com desempate infinito.

⁷Note que essas duas opções são equivalentes a somar 5 no dígito à direita do corte e depois arredondar por corte, ou seja, arredondar por corte

Agora, no caso de empate, i.e. $d_{k+1}, d_{k+2}d_{k+3}... = 5$, então x é aproximado por

$$\bar{x} = \pm d_0, d_1 d_2 \dots d_k \times 10^e$$
 (2.40)

caso d_k seja par e, caso contrário, por

$$\bar{x} = \pm (d_0, d_1 d_2 \dots d_k + 10^{-k}) \times 10^e.$$
 (2.41)

Observação 2.3.1. O arredondamento por proximidade é frequentemente empregado para arredondamentos de números reais para inteiros. Por exemplo:

- x = 1.49 arredonda-se para o inteiro 1.
- x = 1,50 arredonda-se para o inteiro 2.
- x = 2,50 arredonda-se para o inteiro 3.

```
>> round(1.49)
ans = 1
>> round(1.50)
ans = 2
>> round(2.50)
ans = 3
```

Exemplo 2.3.2. Represente os números $x_1 = 0,567$, $x_2 = 0,233$, $x_3 = -0,675$ e $x_4 = 0,314159265... \times 10^1$ com dois dígitos significativos por truncamento e arredondamento.

Solução. Vejamos cada caso:

• Por truncamento:

$$x_1 = 0.56, \quad x_2 = 0.23, \quad x_3 = -0.67 \quad \text{e} \quad x_4 = 3.1.$$
 (2.42)

No GNU Octave, podemos obter a representação de $x_3 = -0.675$ fazendo:

>> printf("
$$1.2f\n$$
", ceil(-0.675*1e2)/1e2) -0.67

e, em notação normalizada, temos:

>> printf("
$$1.1e\n$$
", ceil(-0.675*1e2)/1e2)
-6.7e-01

Em GNU Octave, a representação de números por arredondamento por proximidade com desempate par é o padrão. Assim, para obtermos a representação desejada de $x_3=0.675$ fazemos:

```
>> printf("%1.2f\n", -0.675)
-0.68
```

e, em notação normalizada, temos:

```
>> printf("%1.1e\n", -0.675) -6.8e-01
```

 \Diamond

Observação 2.3.2. Observe que o arredondamento pode mudar todos os dígitos e o expoente da representação em ponto flutuante de um número dado. Por exemplo, o arredondamento de 0.9999×10^{-1} com 3 dígitos significativos é 0.1×10^{0} .

Exercícios resolvidos

Esta seção carece de exercícios resolvidos. Participe da sua escrita.

Veja como em:

https://github.com/livroscolaborativos/CalculoNumerico

Exercícios

E 2.3.1. Aproxime os seguintes números para 2 dígitos significativos por arredondamento por truncamento.

- (a) 1,159
- (b) 7,399
- (c) -5,901

E 2.3.2. Aproxime os seguintes números para 2 dígitos significativos por arredondamento por proximidade com desempate par.

- (a) 1,151
- (b) 1,15

- (c) 2,45
- (d) -2.45

E 2.3.3. O GNU Octave usa arredondamento por proximidade com desempate par como padrão. Assim sendo, por exemplo

```
>> printf('%1.1e\n', 1.25)
1.2e+00
Agora:
>> printf('%1.1e\n', 2.45)
2.5e+00
```

Não deveria ser 2.4? Explique o que está ocorrendo.

2.4 Representação de números em máquina

Os computadores, em geral, usam a base binária para representar os números, onde as posições, chamadas de bits, assumem as condições "verdadeiro" ou "falso", ou seja, 1 ou 0, respectivamente. Os computadores representam os números com uma quantidade fixa de bits, o que se traduz em um conjunto finito de números representáveis. Os demais números são tomados por proximidade àqueles conhecidos, gerando erros de arredondamento. Por exemplo, em aritmética de computador, o número 2 tem representação exata, logo $2^2 = 4$, mas $\sqrt{3}$ não tem representação finita, logo $(\sqrt{3})^2 \neq 3$.

Veja isso no GNU Octave:

```
>> 2^2 == 4
ans = 1
>> sqrt(3)^2 == 3
ans = 0
```

2.4.1 Números inteiros

Tipicamente, um número inteiro é armazenado em um computador como uma sequência de dígitos binários de comprimento fixo denominado **registro**.

Representação sem sinal

Um registro com n bits da forma

representa o número $(d_{n-1}d_{n-2}...d_1d_0)_2$.

Assim, é possível representar números inteiros entre $2^n - 1$ e 0, sendo

$$[111 \dots 111] = 2^{n-1} + 2^{n-2} + \dots + 2^1 + 2^0 = 2^n - 1,$$

$$\vdots$$

$$[000 \dots 011] = 3,$$

$$[000 \dots 010] = 2,$$

$$[000 \dots 001] = 1,$$

$$[000 \dots 000] = 0.$$

$$(2.43)$$

Exemplo 2.4.1. No Scilab,

Representação com bit de sinal

O bit mais significativo (o primeiro à esquerda) representa o sinal: por convenção, 0 significa positivo e 1 significa negativo. Um registro com n bits da forma

representa o número $(-1)^s(d_{n-2}\dots d_1d_0)_2$. Assim, é possível representar números inteiros entre $1-2^{n-1}$ e $2^{n-1}-1$, com duas representações para o zero: $(1000\dots 000)_2$ e $(00000\dots 000)_2$.

Exemplo 2.4.2. Em um registro com 8 bits, teremos os números

$$[11111111] = -(2^6 + \dots + 2 + 1) = -127,$$

$$\vdots$$

$$[10000001] = -1,$$

$$[10000000] = -0,$$

$$[01111111] = 2^6 + \dots + 2 + 1 = 127,$$

$$\vdots$$

$$[00000010] = 2,$$

$$[00000001] = 1,$$

$$[00000000] = 0.$$

Representação complemento de dois

O bit mais significativo (o primeiro à esquerda) representa o coeficiente de -2^{n-1} . Um registro com n bits da forma:

representa o número $-d_{n-1}2^{n-1} + (d_{n-2} \dots d_1 d_0)_2$.

Observação 2.4.1. Note que todo registro começando com 1 será um número negativo.

Exemplo 2.4.3. O registro com 8 bits [01000011] representa o número:

$$-0(2^7) + (1000011)_2 = 2^6 + 2 + 1 = 67. (2.45)$$

Agora, o registro [10111101] representa:

$$-1(2^7) + (0111101)_2 = -128 + 2^5 + 2^4 + 2^3 + 2^2 + 1 = -67.$$
 (2.46)

Note que podemos obter a representação de -67 invertendo os dígitos de 67 em binário e somando 1.

Exemplo 2.4.4. Em um registro com 8 bits, teremos os números

$$[11111111] = -2^{7} + 2^{6} + \dots + 2 + 1 = -1$$

$$\vdots$$

$$[10000001] = -2^{7} + 1 = -127$$

$$[10000000] = -2^{7} = -128$$

$$[01111111] = 2^{6} + \dots + 2 + 1 = 127$$

$$\vdots$$

$$[00000010] = 2$$

$$[00000001] = 1$$

$$[00000000] = 0$$

O GNU Octave trabalha com representação complemento de 2 de números inteiros. O comando bitunpack mostra o barramento de um número dado, por exemplo:

mostra o barramento com 8 bits do número inteiro 3. Note que a ordem dos bits é inversa daquela apresentada no texto acima. Aqui, o bit mais à esquerda fornece o coeficiente de 2^0 , enquanto o bit mais à direita fornece o coeficiente de -2^7 .

O comando bitpack converte um barramento para o número em decimal, por exemplo:

2.4.2 Sistema de ponto fixo

O sistema de ponto fixo representa as partes inteira e fracionária do número com uma quantidade fixa de dígitos.

Exemplo 2.4.5. Em um computador de 32 bits que usa o sistema de ponto fixo, o registro

pode representar o número

Prof. M.e Daniel Cassimiro

• $(-1)^{d_{31}}(d_{30}d_{29}\cdots d_{17}d_{16}, d_{15}d_{14}\cdots d_{1}d_{0})_2$ se o sinal for representado por um dígito. Observe que, neste caso, o zero possui duas representações possíveis:

e

• $(d_{30}d_{29}\cdots d_{17}d_{16})_2 - d_{31}(2^{15} - 2^{-16}) + (0,d_{15}d_{14}\cdots d_1d_0)_2$ se o sinal do número estiver representado por uma implementação em complemento de um. Observe que o zero também possui duas representações possíveis:

e

• $(d_{30}d_{29}\cdots d_{17}d_{16})_2 - d_{31}2^{15} + (0,d_{15}d_{14}\cdots d_1d_0)_2$ se o sinal do número estiver representado por uma implementação em complemento de dois. Nesse caso o zero é unicamente representado por

Observe que 16 dígitos são usados para representar a parte fracionária, 15 são para representar a parte inteira e um dígito, o d_{31} , está relacionado ao sinal do número.

2.4.3 Sistema de ponto flutuante

O sistema de ponto flutuante não possui quantidade fixa de dígitos para as partes inteira e fracionária do número.

Podemos definir uma máquina F em ponto flutuante de dois modos:

$$F(\beta, |M|, |E|, BIAS)$$
 ou $F(\beta, |M|, E_{MIN}, E_{MAX})$ (2.53)

onde

- β é a base (em geral 2 ou 10),
- |M| é o número de dígitos da mantissa,
- |E| é o número de dígitos do expoente,
- BIAS é um valor de deslocamento do expoente (veja a seguir),

- E_{MIN} é o menor expoente,
- E_{MAX} é o maior expoente.

Considere uma máquina com um registro de 64 bits e base $\beta=2$. Pelo padrão IEEE754, 1 bit é usado para o sinal, 11 bits para o expoente e 52 bits são usados para o significando tal que

represente o número (o BIAS = 1023 por definição)

$$x = (-1)^s M \times 2^{c-BIAS},$$
 (2.54)

onde a característica é representada por

$$c = (c_{10}c_9 \cdots c_1c_0)_2 = c_{10}2^{10} + \cdots + c_12^1 + c_02^0$$
(2.55)

e o significando por

$$M = (1.m_1 m_2 \cdots m_{51} m_{52})_2. \tag{2.56}$$

Observação 2.4.2. Em base 2 não é necessário armazenar o primeiro dígito (por quê?).

Exemplo 2.4.6. O registro

$$[0|100\ 0000\ 0000|1010\ 0000\ 0000\dots 0000\ 0000] \tag{2.57}$$

representa o número

$$(-1)^{0}(1+2^{-1}+2^{-3}) \times 2^{1024-1023} = (1+0.5+0.125)2 = 3.25.$$
 (2.58)

Observação 2.4.3. No GNU Octave, podemos usar os comandos bitpack e bitunpack transformar um registro de ponto flutuante de 64 bits em decimal e vice-versa. Entretanto, um tal registro no GNU Octave tem a seguinte estrutura

$$[m_{52}m_{51}m_{50}\dots m_1|c_0c_1c_2\cdots c_{10}|s].$$
 (2.59)

Desta forma, o decimal 3.25 tem, aqui, o registro

$$[000\dots0101|000\dots01|0]. \tag{2.60}$$

O que podemos verificar com o comando

>> bitpack(logical([zeros(1,49) 1 0 1 zeros(1,10) 1 0]), 'double')
ans = 3.2500

O expoente deslocado

Uma maneira de representar os expoentes inteiros é deslocar todos eles uma mesma quantidade. Desta forma permitimos a representação de números negativos e a ordem deles continua crescente. O expoente é representado por um inteiro sem sinal do qual é deslocado o **BIAS**.

Tendo |E| dígitos para representar o expoente, geralmente o BIAS é predefinido de tal forma a dividir a tabela ao meio de tal forma que o expoente um seja representado pelo sequência [100...000].

Exemplo 2.4.7. Com 64 bits, pelo padrão IEEE754, temos que |E| := 11. Assim, $(100\ 0000\ 0000)_2 = 2^{10} = 1024$. Como queremos que esta sequência represente o 1, definimos BIAS := 1023, pois

$$1024 - BIAS = 1. (2.61)$$

Com 32 bits, temos |E|:=8 e BIAS:=127. E com 128 bits, temos |E|:=15 e BIAS:=16383.

$$Com |E| = 11 temos$$

$$[111\ 1111\ 1111] = \text{reservado}$$

$$[111\ 1111\ 1110] = 2046 - BIAS = 1023_{10} = E_{MAX}$$

$$\vdots =$$

$$[100\ 0000\ 0001] = 2^{10} + 1 - BIAS = 2_{10}$$

$$[100\ 0000\ 0000] = 2^{10} - BIAS = 1_{10}$$

$$[011\ 1111\ 1111] = 1023 - BIAS = 0_{10}$$

$$[011\ 1111\ 1110] = 1022 - BIAS = -1_{10}$$

$$\vdots =$$

$$[000\ 0000\ 0001] = 1 - BIAS = -1022 = E_{MIN}$$

$$[000\ 0000\ 0000] = \text{reservado}$$

O maior expoente é dado por $E_{MAX}=1023$ e o menor expoente é dado por $E_{MIN}=-1022$.

O menor número representável positivo é dado pelo registro

$$[0|000\ 0000\ 0001|0000\ 0000\ 0000\ \dots 0000\ 0000] \tag{2.63}$$

quando s = 0, c = 1 e $M = (1.000...000)_2$, ou seja,

$$MINR = (1+0)_2 \times 2^{1-1023} \approx 0.2225 \times 10^{-307}.$$
 (2.64)

O maior número representável é dado por

$$[0|111 \ 1111 \ 1110|1111 \ 1111 \ \cdots \ 1111 \ 1111]$$
 (2.65)

quando s=0, c=2046 e $M=(1.1111\ 11111\cdots\ 1111)_2=2-2^{-52},$ ou seja,

$$MAXR = (2 - 2^{-52}) \times 2^{2046 - 1023} \approx 2^{1024} \approx 0.17977 \times 10^{309}.$$
 (2.66)

Observação 2.4.4. No GNU Octave, podemos obter o maior e o menor double positivo não nulo com os comandos:

>> realmax

ans = 1.7977e + 308

>> realmin

ans = 2.2251e-308

Casos especiais

O zero é um caso especial representado pelo registro

$$[0|000 0000 0000|0000 0000 0000...0000 0000] (2.67)$$

Os expoentes **reservados** são usados para casos especiais:

- c = [0000...0000] é usado para representar o zero (se m = 0) e os números subnormais (se $m \neq 0$).
- c = [1111...1111] é usado para representar o infinito (se m = 0) e NaN (se $m \neq 0$).

Os números subnormais⁸ tem a forma

$$x = (-1)^s (0.m_1 m_2 \cdots m_{51} m_{52})_2 \times 2^{1-BIAS}.$$
 (2.68)

2.4.4 Precisão e épsilon de máquina

A **precisão** p de uma máquina é o número de dígitos significativos usado para representar um número. Note que p = |M| + 1 em binário e p = |M| para outras bases.

O épsilon de máquina, $\epsilon_{mach} = \epsilon$, é definido de forma que $1 + \epsilon$ seja o menor número representável maior que 1, isto é, $1 + \epsilon$ é representável, mas não existem números representáveis em $(1, 1 + \epsilon)$.

⁸Note que poderíamos definir números um pouco menores que o MINR.

Exemplo 2.4.8. Com 64 bits, temos que o épsilon será dado por

$$1 \to (1.0000\ 0000....0000)_2 \times 2^0$$

$$\epsilon \to +(0.0000\ 0000....0001)_2 \times 2^0 = 2^{-52}$$

$$(1.0000\ 0000....0001)_2 \times 2^0 \neq 1$$

$$(2.69)$$

Assim, $\epsilon = 2^{-52}$.

Observação 2.4.5. No GNU Octave, o épsilon de máquina é representado pela constante eps. Observe os seguintes resultados:

```
>> 1 + 1e-16 == 1
ans = 1
>> 1 + eps == 1
ans = 0
```

2.4.5 Distribuição dos números

Utilizando uma máquina em ponto flutuante, temos um número finito de números que podemos representar.

Um número muito pequeno geralmente é aproximado por zero (**underflow**) e um número muito grande (**overflow**) geralmente faz o cálculo parar. Além disso, os números não estão uniformemente espaçados no eixo real. Números pequenos estão bem próximos enquanto que números com expoentes grandes estão bem distantes.

Se tentarmos armazenar um número que não é representável, devemos utilizar o número mais próximo, gerando os erros de arredondamento.

Observação 2.4.6. Veja como o GNU Octave se comporta nos seguintes casos de exceção:

```
>> 0/0
warning: division by zero
ans = NaN
>> 1/0
warning: division by zero
ans = Inf
>> 1/-0
warning: division by zero
ans = -Inf
>> 2*realmax
ans = Inf
>> 1/2^9999
ans = 0
```

Prof. M.e Daniel Cassimiro

Exercícios

E 2.4.1.	Usando	a representaçã	o compleme	nto de	dois de	números	inteiros
com 8 bits, e	screva o n	número decimal	que corresp	onde a	os segui	ntes barra	mentos:

- a) [01100010].
- b) [00011101].
- c) [10000000].
- d) [11100011].
- e) [11111111]

E 2.4.2. Usando a representação complemento de dois de números inteiros com 16 bits, escreva o número decimal que corresponde aos seguintes barramentos:

- a) [0110001001100010].
- b) [0001110100011101].
- c) [1110001011100011].
- d) [111111111111111].

E 2.4.3. Usando a representação complemento de dois de números inteiros com 8 **bits** no GNU Octave, escreva o número decimal que corresponde aos seguintes barramentos:

- a) [01100010].
- b) [00011101].
- c) [00010010].

E 2.4.4. Usando a representação complemento de dois de números inteiros com 16 **bits** no GNU Octave, escreva o número decimal que corresponde aos seguintes barramentos:

- a) [0110001001100010].
- b) [0001110100011101].

- c) [0001001011100010].
- **E 2.4.5.** Usando a representação de ponto flutuante com 64 **bits**, escreva o número decimal que corresponde aos seguintes barramentos:
- a) [0|10000000000|111000...0].
- b) [1|10000000001|0111000...0].
 - E 2.4.6. Explique a diferença entre o sistema de ponto fixo e ponto flutuante.
- E 2.4.7. Usando a representação de double no GNU Octave, escreva o número decimal que corresponde aos seguintes barramentos:
- a) [000...0111|00000000001|0].
- b) [000...01110|10000000001|1].
 - E 2.4.8. Considere a seguinte rotina escrita para ser usada no GNU Octave:

```
x=1
while x+1>x
x=x+1
end
```

Explique se esta rotina finaliza em tempo finito, em caso afirmativo calcule a ordem de grandeza do tempo de execução supondo que cada passo do laço demore $10^{-7}s$. Justifique sua reposta.

2.5 Tipos de erros

Em geral, os números não são representados de forma exata nos computadores. Isto nos leva ao chamado erro de arredondamento. Quando resolvemos problemas com técnicas numéricas, estamos sujeitos a este e outros tipos de erros. Nesta seção, veremos quais são estes erros e como controlá-los, quando possível.

Quando fazemos aproximações numéricas, os erros são gerados de várias formas, sendo as principais delas as seguintes:

1. Incerteza dos dados são devidos aos erros nos dados de entrada. Quando o modelo matemático é oriundo de um problema físico, existe incerteza nas medidas feitas pelos instrumentos de medição, que possuem acurácia finita.

- 2. Erros de Arredondamento são aqueles relacionados com as limitações existentes na forma de representar números em máquina.
- 3. Erros de Truncamento surgem quando aproximamos um conceito matemático formado por uma sequência infinita de passos por de um procedimento finito. Por exemplo, a definição de integral é dada por um processo de limite de somas. Numericamente, aproximamos por um soma finita. O erro de truncamento deve ser estudado analiticamente para cada método empregado e normalmente envolve matemática mais avançada que a estudado em um curso de graduação.

Uma questão fundamental é a quantificação dos erros imbricados na computação da solução de um dado problema. Para tanto, precisamos definir medidas de erros (ou de exatidão). As medidas de erro mais utilizadas são o **erro absoluto** e o **erro relativo**.

Definição 2.5.1 (Erro absoluto e relativo). Seja x um número real e \overline{x} , sua aproximação. O erro absoluto da aproximação \overline{x} é definido como

$$|x - \overline{x}|. \tag{2.70}$$

O erro relativo da aproximação \overline{x} é definido como

$$\frac{|x-\overline{x}|}{|x|}, \quad x \neq 0. \tag{2.71}$$

Observação 2.5.1. Observe que o erro relativo é adimensional e, muitas vezes, é expresso em porcentagens. Mais precisamente, o erro relativo em porcentagem da aproximação \overline{x} é dado por

$$\frac{|x - \bar{x}|}{|x|} \times 100\%.$$
 (2.72)

Exemplo 2.5.1. Sejam x=123456,789 e sua aproximação $\bar{x}=123000$. O erro absoluto é

$$|x - \bar{x}| = |123456,789 - 123000| = 456,789$$
 (2.73)

e o erro relativo é

$$\frac{|x - \bar{x}|}{|x|} = \frac{456,789}{123456,789} \approx 0,00369999 \text{ ou } 0,36\%$$
 (2.74)

Exemplo 2.5.2. Sejam y = 1,23456789 e $\bar{y} = 1,13$. O erro absoluto é

$$|y - \bar{y}| = |1,23456789 - 1,13| = 0,10456789$$
 (2.75)

que parece pequeno se compararmos com o exemplo anterior. Entretanto o erro relativo é

$$\frac{|y - \bar{y}|}{|y|} = \frac{0.10456789}{1.23456789} \approx 0.08469999 \text{ ou } 8.4\%$$
 (2.76)

Note que o erro relativo leva em consideração a escala do problema.

Exemplo 2.5.3. Observe os erros absolutos e relativos em cada caso a seguir:

\overline{x}	\bar{x}	Erro absoluto	Erro relativo
$0,\overline{3}\times10^{-2}$	0.3×10^{-2}	$0,\overline{3}\times10^{-3}$	10%
$0,\overline{3}$	0,3	$0,\overline{3}\times10^{-2}$	10%
$0,\overline{3} \times 10^2$	0.3×10^2	$0,\overline{3} \times 10^{1}$	10%

Outra forma de medir a exatidão de uma aproximação numérica é contar o **número de dígitos significativos corretos** em relação ao valor exato.

Definição 2.5.2 (Número de dígitos significativos corretos). A aproximação \overline{x} de um número x tem s dígitos significativos corretos quando⁹

$$\frac{|x-\overline{x}|}{|x|} < 5 \times 10^{-s}.\tag{2.78}$$

Exemplo 2.5.4. Vejamos os seguintes casos:

a) A aproximação de x=0.333333 por $\overline{x}=0.333$ tem 3 dígitos significativos corretos, pois

$$\frac{|x - \overline{x}|}{|x|} = \frac{0,000333}{0.333333} \approx 0,000999 \le 5 \times 10^{-3}.$$
 (2.79)

b) Considere as aproximações $\bar{x}_1=0,666$ e $\bar{x}_2=0,667$ de x=0,666888. Os erros relativos são

$$\frac{|x - \bar{x}_1|}{|x|} = \frac{|0.666888 - 0.666|}{0.666888} \approx 0.00133... < 5 \times 10^{-3}.$$
 (2.80)

$$DIGSE(x,\bar{x}) = s \approx int \left| \log_{10} \frac{|x - \bar{x}|}{|x|} \right|.$$
 (2.77)

 $^{^9}$ Esta definição é apresentada em [?]. Não existe uma definição única na literatura para o conceito de dígitos significativos corretos, embora não precisamente equivalentes, elas transmitem o mesmo conceito. Uma maneira de interpretar essa regra é: calcula-se o erro relativo na forma normalizada e a partir da ordem do expoente temos o número de dígitos significativos corretos. Como queremos o expoente, podemos estimar s por

$$\frac{|x - \bar{x}_2|}{|x|} = \frac{|0,666888 - 0,667|}{0,666888} \approx 0,000167... < 5 \times 10^{-4}.$$
 (2.81)

Note que \bar{x}_1 possui 3 dígitos significativos corretos e \bar{x}_2 possui 4 dígitos significativos (o quarto dígito é o dígito 0 que não aparece à direita, i.e, $\bar{x}_2 = 0.6670$. Isto também leva a conclusão que x_2 aproxima melhor o valor de x do que x_1 pois está mais próximo de x.

c) $\overline{x} = 9{,}999$ aproxima x = 10 com 4 dígitos significativos corretos, pois

$$\frac{|x - \overline{x}|}{|x|} = \frac{|10 - 9.999|}{10} \approx 0.0000999... < 5 \times 10^{-4}.$$
 (2.82)

d) Considere as aproximações $\overline{x}_1 = 1{,}49$ e $\overline{x}_2 = 1{,}5$ de x = 1. Da definição, temos que 1,49 aproxima 1 com um dígito significativo correto (verifique), enquanto 1,5 tem zero dígito significativo correto, pois:

$$\frac{|1-1.5|}{|1|} = 5 \times 10^{-1} < 5 \times 10^{0}.$$
 (2.83)

Exercícios

E 2.5.1. Calcule os erros absoluto e relativo das aproximações \bar{x} para x em cada caso:

- a) $x = \pi = 3.14159265358979...$ e $\bar{x} = 3.141$
- b) $x = 1,00001 \text{ e } \bar{x} = 1$
- c) $x = 100001 \text{ e } \bar{x} = 100000$

E 2.5.2. Arredonde os seguintes números para cinco algarismos significativos:

- a) 1,7888544
- b) 1788,8544
- c) 0,0017888544
- d) 0,004596632
- e) $2,1754999 \times 10^{-10}$
- f) 2.1754999×10^{10}

Prof. M.e Daniel Cassimiro

E 2.5.3. Represente os seguintes números com três dígitos significativos usando arredondamento por truncamento e arredondamento por proximidade.

- a) 3276.
- b) 42,55.
- c) 0,00003331.

E 2.5.4. Usando a Definição 2.5.2, verifique quantos são os dígitos significativos corretos na aproximação de x por \bar{x} .

a)
$$x = 2.5834 \text{ e } \bar{x} = 2.6$$

b)
$$x = 100 \text{ e } \bar{x} = 99$$

- **E 2.5.5.** Resolva a equação 0.1x 0.01 = 12 usando arredondamento com três dígitos significativos em cada passo e compare com o resultado exato.
- **E 2.5.6.** Calcule o erro relativo e absoluto envolvido nas seguintes aproximações e expresse as respostas com três algarismos significativos corretos.
- a) x = 3.1415926535898 e $\tilde{x} = 3.141593$

b)
$$x = \frac{1}{7} \in \tilde{x} = 1.43 \times 10^{-1}$$

2.6 Erros nas operações elementares

O erro relativo presente nas operações elementares de adição, subtração, multiplicação e divisão é da ordem do épsilon de máquina. Se estivermos usando o sistema de numeração binary64 ou double, temos $\epsilon = 2^{-52} \approx 2,22 \cdot 10^{-16}$.

Este erro é bem pequeno para a maioria das aplicações! Assumindo que x e y são representados com todos dígitos corretos, esperamos ter aproximadamente 15 dígitos significativos corretos quando fazemos uma das operações $x+y, x-y, x \times y$ ou x/y.

Mesmo que fizéssemos, por exemplo, 1000 operações elementares sucessivas em ponto flutuante, teríamos, no pior dos casos, acumulado todos esses erros e perdido 3 casas decimais $(1000 \times 10^{-15} \approx 10^{-12})$.

Entretanto, existem situações em que o erro se propaga de forma muito catastrófica, em especial, quando subtraímos números positivos muito próximos.

2.7 Cancelamento catastrófico

Quando fazemos subtrações com números muito próximos entre si, ocorre o que chamamos de "cancelamento catastrófico", onde podemos perder vários dígitos de precisão em uma única subtração.

Exemplo 2.7.1. Efetue a operação

$$0.987624687925 - 0.987624 = 0.687925 \times 10^{-6}$$
 (2.87)

usando arredondamento com seis dígitos significativos e observe a diferença se comparado com resultado sem arredondamento.

Solução. Os números arredondados com seis dígitos para a mantissa resultam na seguinte diferença

$$0.987625 - 0.987624 = 0.100000 \times 10^{-5} \tag{2.88}$$

Observe que os erros relativos entre os números exatos e aproximados no lado esquerdo são bem pequenos,

$$\frac{|0.987624687925 - 0.987625|}{|0.987624687925|} = 0.00003159$$
 (2.89)

e

$$\frac{|0.987624 - 0.987624|}{|0.987624|} = 0\%, (2.90)$$

enquanto no lado direito o erro relativo é enorme:

$$\frac{|0,100000 \times 10^{-5} - 0,687925 \times 10^{-6}|}{0.687925 \times 10^{-6}} = 45,36\%.$$
 (2.91)

 \Diamond

Exemplo 2.7.2. Considere o problema de encontrar as raízes da equação de segundo grau

$$x^2 + 300x - 0.014 = 0, (2.92)$$

usando seis dígitos significativos.

Aplicando a fórmula de Bhaskara com $a=0,100000\times 10^1,\,b=0,300000\times 10^3$ e $c=0,140000\times 10^{-1},$ temos o discriminante:

$$\Delta = b^2 - 4 \cdot a \cdot c \tag{2.93}$$

$$= 0.300000 \times 10^3 \times 0.300000 \times 10^3 \tag{2.94}$$

$$+ 0.400000 \times 10^{1} \times 0.100000 \times 10^{1} \times 0.140000 \times 10^{-1}$$
 (2.95)

$$= 0.900000 \times 10^5 + 0.560000 \times 10^{-1} \tag{2.96}$$

$$= 0.900001 \times 10^5 \tag{2.97}$$

e as raízes:

$$x_1, x_2 = \frac{-0.300000 \times 10^3 \pm \sqrt{\Delta}}{0.200000 \times 10^1}$$
 (2.98)

$$= \frac{-0.300000 \times 10^3 \pm \sqrt{0.900001 \times 10^5}}{0.200000 \times 10^1}$$
 (2.99)

$$= \frac{-0.300000 \times 10^3 \pm 0.300000 \times 10^3}{0.200000 \times 10^1}$$
 (2.100)

(2.101)

Então, as duas raízes obtidas com erros de arredondamento, são:

$$\tilde{x}_1 = \frac{-0.300000 \times 10^3 - 0.300000 \times 10^3}{0.200000 \times 10^1}$$

$$= -\frac{0.600000 \times 10^3}{0.200000 \times 10^1} = -0.300000 \times 10^3$$
(2.102)

е

$$\tilde{x}_2 = \frac{-0,300000 \times 10^3 + 0,300000 \times 10^3}{0,200000 \times 10^1} = 0,000000 \times 10^0$$
 (2.103)

No entanto, os valores das raízes com seis dígitos significativos livres de erros de arredondamento, são:

$$x_1 = -0.300000 \times 10^3$$
 e $x_2 = 0.466667 \times 10^{-4}$. (2.104)

Observe que a primeira raiz apresenta seis dígitos significativos corretos, mas a segunda não possui nenhum dígito significativo correto.

Observe que isto acontece porque b^2 é muito maior que 4ac, ou seja, $b \approx \sqrt{b^2 - 4ac}$, logo a diferença

$$-b + \sqrt{b^2 - 4ac} \tag{2.105}$$

estará próxima de zero. Uma maneira de evitar o cancelamento catastrófico é aplicar procedimentos analíticos na expressão para eliminar essa diferença. Um técnica padrão consiste usar uma expansão em série de Taylor em torno da origem, tal como:

$$\sqrt{1-x} = 1 - \frac{1}{2}x + O(x^2). \tag{2.106}$$

Substituindo esta aproximação na fórmula de Bhaskara, temos:

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

$$= \frac{-b \pm b\sqrt{1 - \frac{4ac}{b^2}}}{2a}$$

$$\approx \frac{-b \pm b\left(1 - \frac{4ac}{2b^2}\right)}{2a}$$
(2.107)
$$(2.108)$$

$$= \frac{-b \pm b\sqrt{1 - \frac{4ac}{b^2}}}{2a} \tag{2.108}$$

$$\approx \frac{-b \pm b \left(1 - \frac{4ac}{2b^2}\right)}{2a} \tag{2.109}$$

(2.110)

Observe que $\frac{4ac}{h^2}$ é um número pequeno e por isso a expansão faz sentido. Voltamos no exemplo anterior e calculamos as duas raízes com o nova expressão

$$\tilde{x}_1 = \frac{-b - b + \frac{4ac}{2b}}{2a} = -\frac{b}{a} + \frac{c}{b}$$
 (2.111)

$$= -\frac{0,300000 \times 10^3}{0,100000 \times 10^1} - \frac{0,140000 \times 10^{-1}}{0,300000 \times 10^3}$$
 (2.112)

$$= -0.300000 \times 10^{3} - 0.466667 \times 10^{-4} \tag{2.113}$$

$$= -0.300000 \times 10^3 \tag{2.114}$$

$$\tilde{x}_2 = \frac{-b + b - \frac{4ac}{2b}}{2a} \tag{2.115}$$

$$= -\frac{4ac}{4ab} \tag{2.116}$$

$$= -\frac{c}{b} = -\frac{-0.140000 \times 10^{-1}}{0.300000 \times 10^{3}} = 0.466667 \times 10^{-4}$$
 (2.117)

(2.118)

Observe que o efeito catastrófico foi eliminado.

Observação 2.7.1. O cancelamento catastrófico também poderia ter sido evitado através do seguinte truque analítico:

$$x_{2} = \frac{-b + \sqrt{b^{2} - 4ac}}{2a} = \frac{-b + \sqrt{b^{2} - 4ac}}{2a} \cdot \frac{-b - \sqrt{b^{2} - 4ac}}{-b - \sqrt{b^{2} - 4ac}}$$
(2.119)
$$= \frac{b^{2} - (b^{2} - 4ac)}{2a\left(-b - \sqrt{b^{2} - 4ac}\right)} = \frac{4ac}{2a\left(-b - \sqrt{b^{2} - 4ac}\right)}$$
(2.120)
$$= -\frac{2c}{\left(b + \sqrt{b^{2} - 4ac}\right)}$$
(2.121)

$$= \frac{b^2 - (b^2 - 4ac)}{2a\left(-b - \sqrt{b^2 - 4ac}\right)} = \frac{4ac}{2a\left(-b - \sqrt{b^2 - 4ac}\right)}$$
(2.120)

$$= -\frac{2c}{\left(b + \sqrt{b^2 - 4ac}\right)} \tag{2.121}$$

2.8 Condicionamento de um problema

Nesta seção, utilizaremos a seguinte descrição abstrata para o conceito de "resolver um problema": dado um conjunto de dados de entrada, encontrar os dados de saída. Se denotamos pela variável x os dados de entrada e pela variável y os dados de saída, resolver o problema significa encontrar y dado x. Em termos matemáticos, a resolução de um problema é realizada pelo mapeamento $f: x \to y$, ou simplesmente y = f(x).

E certo que, na maioria das aplicações, os dados de entrada do problema — isto é, x — não são conhecidos com total exatidão, devido a diversas fontes de erros, como incertezas na coleta dos dados e erros de arredondamento. O conceito de condicionamento está relacionado à forma como os erros nos dados de entrada influenciam os dados de saída.

Para fins de análise, denotaremos por x, os dados de entrada com precisão absoluta e por x^* , os dados com erro. Definiremos também a solução y^* , do problema com dados de entrada x^* , ou seja, $y^* = f(x^*)$.

Estamos interessados em saber se os erros cometidos na entrada $\Delta x = x^* - x$ influenciaram na saída do problema $\Delta y = y^* - y$. No caso mais simples, temos que $x \in \mathbb{R}$ e $y \in \mathbb{R}$. Assumindo que f seja diferenciável, a partir da série de Taylor

$$f(x + \Delta x) \approx f(x) + f'(x)\Delta x$$
 (2.122)

obtemos (subtraindo f(x) dos dois lados)

$$\Delta y = f(x + \Delta x) - f(x) \approx f'(x)\Delta x \tag{2.123}$$

Para relacionarmos os erros relativos, dividimos o lado esquerdo por y, o lado direito por f(x) = y e obtemos

$$\frac{\Delta y}{y} \approx \frac{f'(x)}{f(x)} \frac{x\Delta x}{x} \tag{2.124}$$

sugerindo a definição de número de condicionamento de um problema.

Definição 2.8.1. Seja f uma função diferenciável. O número de condicionamento de um problema é definido como

$$\kappa_f(x) := \left| \frac{xf'(x)}{f(x)} \right| \tag{2.125}$$

e fornece uma estimativa de quanto os erros relativos na entrada $\left|\frac{\Delta x}{x}\right|$ serão amplificados na saída $\left|\frac{\Delta y}{y}\right|$.

De modo geral, quando f depende de várias variáveis, podemos obter

$$\delta_f = |f(x_1, x_2, ..., x_n) - f(\bar{x}_1, \bar{x}_2, ..., \bar{x}_n)| \approx \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1, x_2, ..., x_n) \right| \delta_{x_i}$$
 (2.126)

Uma matriz de números de condicionamento também poderia ser obtida como em [?].

Exemplo 2.8.1. Considere o problema de calcular \sqrt{x} em x=2. Se usarmos $x^*=1,999$, quanto será o erro relativo na saída? O erro relativo na entrada é

$$\left| \frac{\Delta x}{x} \right| = \left| \frac{2 - 1,999}{2} \right| = 0,0005$$
 (2.127)

O número de condicionamento do problema calcular a raiz é

$$\kappa_f(x) := \left| \frac{xf'(x)}{f(x)} \right| = \left| \frac{x\frac{1}{2\sqrt{x}}}{\sqrt{x}} \right| = \frac{1}{2}$$
 (2.128)

Ou seja, os erros na entrada serão diminuídos pela metade. De fato, usando $y=\sqrt{2}=1,4142136...$ e $y^*=\sqrt{1,999}=1,41386...$, obtemos

$$\frac{\Delta y}{y} = \frac{\sqrt{2} - \sqrt{1,999}}{\sqrt{2}} \approx 0,000250031... \tag{2.129}$$

Exemplo 2.8.2. Considere a função $f(x) = \frac{10}{1-x^2}$ e $x^* = 0,9995$ com um erro absoluto na entrada de 0,0001.

Calculando $y^* = f(x^*)$ temos

$$y^* = \frac{10}{1 - (0.9995)^2} \approx 10002,500625157739705173 \tag{2.130}$$

Mas qual é a estimativa de erro nessa resposta? Quantos dígitos significativos temos nessa resposta?

Sabendo que $f'(x) = 20x/(1-x^2)^2$, o número de condicionamento é

$$\kappa_f(x) := \left| \frac{xf'(x)}{f(x)} \right| = \left| \frac{2x^2}{1 - x^2} \right|$$
(2.131)

o que nos fornece para $x^* = 0.9995$,

$$\kappa_f(0,9995) \approx 1998,5$$
(2.132)

Como o erro relativo na entrada é

$$\left| \frac{\Delta x}{x} \right| = \left| \frac{0,0001}{0,9995} \right| \approx 0,00010005...$$
 (2.133)

temos que o erro na saída será aproximadamente

$$\left| \frac{\Delta y}{y} \right| \approx \kappa_f(x) \left| \frac{\Delta x}{x} \right| \approx 1998,5 \times 0,00010005... \approx 0,1999$$
 (2.134)

ou seja um erro relativo de aproximadamente 19,99%.

Note que se usarmos $x_1 = 0.9994$ e $x_2 = 0.9996$ (ambos no intervalo do erro absoluto da entrada) encontramos

$$y_1^* \approx 8335,83 \tag{2.135}$$

$$y_2^* \approx 12520,50 \tag{2.136}$$

confirmando a estimativa de 19,99%.

Exemplo 2.8.3. Seja $f(x) = x \exp(x)$. Calcule o erro absoluto ao calcular f(x) sabendo que $x = 2 \pm 0.05$.

Solução. Temos que $x \approx 2$ com erro absoluto de $\delta_x = 0.05$. Neste caso, calculamos δ_f , isto é, o erro absoluto ao calcular f(x), por:

$$\delta_f = |f'(x)|\delta_x. \tag{2.137}$$

Como $f'(x) = (1+x)e^x$, temos:

$$\delta_f = |(1+x)e^x| \cdot \delta_x \tag{2.138}$$

$$= |3e^2| \cdot 0.05 = 1.1084. \tag{2.139}$$

Portanto, o erro absoluto ao calcular f(x) quando $x=2\pm0.05$ é de 1,1084.

Exemplo 2.8.4. Calcule o erro relativo ao medir $f(x,y) = \frac{x^2+1}{x^2}e^{2y}$ sabendo que $x \approx 3$ é conhecido com 10% de erro e $y \approx 2$ é conhecido com 3% de erro.

Solução. Calculamos as derivadas parciais de f:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{2x^3 - (2x^3 + 2x)}{x^4} e^{2y} = -\frac{2e^{2y}}{x^3}$$
 (2.140)

е

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 2\frac{x^2 + 1}{x^2}e^{2y} \tag{2.141}$$

Calculamos o erro absoluto em termos do erro relativo:

$$\frac{\delta_x}{|x|} = 0.1 \Rightarrow \delta_x = 3 \cdot 0.1 = 0.3$$
 (2.142)

$$\frac{\delta_y}{|y|} = 0.03 \Rightarrow \delta_y = 2 \cdot 0.03 = 0.06$$
 (2.143)

Aplicando a expressão para estimar o erro em f temos

$$\delta_f = \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| \delta_x + \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| \delta_y$$

$$= \frac{2e^4}{27} \cdot 0.3 + 2\frac{9+1}{9}e^4 \cdot 0.06 = 8.493045557$$

$$(2.144)$$

$$= \frac{2e^4}{27} \cdot 0.3 + 2\frac{9+1}{9}e^4 \cdot 0.06 = 8.493045557 \tag{2.145}$$

Portanto, o erro relativo ao calcular f é estimado por

$$\frac{\delta f}{|f|} = \frac{8,493045557}{\frac{9+1}{9}e^4} = 14\% \tag{2.146}$$

 \Diamond

Exemplo 2.8.5. No exemplo anterior, reduza o erro relativo em x pela metade e calcule o erro relativo em f. Depois, repita o processo reduzindo o erro relativo em y pela metade.

Solução. Na primeira situação temos x=3 com erro relativo de 5% e $\delta_x=$ $0.05 \cdot 3 = 0.15$. Calculamos $\delta_f = 7.886399450$ e o erro relativo em f de 13%. Na segunda situação, temos y=2 com erro de 1,5% e $\delta_y=2\cdot 0,015=0,03$. Calculamos $\delta_f = 4,853168892$ e o erro relativo em f de 8%. Observe que mesma o erro relativo em x sendo maior, o erro em y é mais significante na função.

Exemplo 2.8.6. Considere um triângulo retângulo onde a hipotenusa e um dos catetos são conhecidos a menos de um erro: hipotenusa $a = 3\pm 0.01$ metros e cateto $b=2\pm0.01$ metros. Calcule o erro absoluto ao calcular a área dessa triângulo.

Solução. Primeiro vamos encontrar a expressão para a área em função da hipotenusa a e um cateto b. A tamanho de segundo cateto c é dado pelo teorema de Pitágoras, $a^2 = b^2 + c^2$, ou seja, $c = \sqrt{a^2 - b^2}$. Portanto a área é

$$A = \frac{bc}{2} = \frac{b\sqrt{a^2 - b^2}}{2}. (2.147)$$

Agora calculamos as derivadas

$$\frac{\partial A}{\partial a} = \frac{ab}{2\sqrt{a^2 - b^2}},\tag{2.148}$$

$$\frac{\partial A}{\partial b} = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{2} - \frac{b^2}{2\sqrt{a^2 - b^2}},\tag{2.149}$$

e substituindo na estimativa para o erro δ_A em termos de $\delta_a=0.01$ e $\delta_b=0.01$:

$$\delta_A \approx \left| \frac{\partial A}{\partial a} \right| \delta_a + \left| \frac{\partial A}{\partial b} \right| \delta_b$$
 (2.150)

$$\approx \frac{3\sqrt{5}}{5} \cdot 0.01 + \frac{\sqrt{5}}{10} \cdot 0.01 = 0.01565247584 \tag{2.151}$$

Em termos do erro relativo temos erro na hipotenusa de $\frac{0,01}{3}\approx 0,333\%$, erro no cateto de $\frac{0,01}{2}=0,5\%$ e erro na área de

$$\frac{0,01565247584}{\frac{2\sqrt{3^2-2^2}}{2}} = 0,7\% \tag{2.152}$$

 \Diamond

Exercícios

E 2.8.1. Considere que a variável $x \approx 2$ é conhecida com um erro relativo de 1% e a variável $y \approx 10$ com um erro relativo de 10%. Calcule o erro relativo associado a z quando:

$$z = \frac{y^4}{1 + y^4} e^x. (2.153)$$

Suponha que você precise conhecer o valor de z com um erro de 0,5%. Você propõe uma melhoria na medição da variável x ou y? Explique.

E 2.8.2. A corrente I em ampéres e a tensão V em volts em uma lâmpada se relacionam conforme a seguinte expressão:

$$I = \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\alpha},\tag{2.154}$$

onde α é um número entre 0 e 1 e V_0 é tensão nominal em volts. Sabendo que $V_0 = 220 \pm 3\%$ e $\alpha = -0.8 \pm 4\%$, calcule a corrente e o erro relativo associado quando a tensão vale $220 \pm 1\%$.

Obs:. Este problema pode ser resolvido de duas formas distintas: usando a expressão aproximada para a propagação de erro e inspecionando os valores máximos e mínimos que a expressão pode assumir. Pratique os dois métodos.**Dica:** lembre que $x^{\alpha} = e^{\alpha \ln(x)}$

2.9 Exemplos selecionados de cancelamento catastrófico

Exemplo 2.9.1. Considere o seguinte processo iterativo:

$$x^{(1)} = \frac{1}{3} (2.155)$$

$$x^{(n+1)} = 4x^{(n)} - 1, \quad n = 1, 2, \dots$$
 (2.156)

Observe que $x^{(1)} = \frac{1}{3}$, $x^{(2)} = 4 \cdot \frac{1}{3} - 1 = \frac{1}{3}$, $x^{(3)} = \frac{1}{3}$, ou seja, temos uma sequência constante igual a $\frac{1}{3}$. No entanto, ao calcularmos no computador, usando o sistema de numeração double, a sequência obtida não é constante e, de fato, diverge.

Faça o teste no GNU Octave, colocando:

$$>> x = 1/3$$

e itere algumas vezes a linha de comando:

$$>> x = 4*x-1$$

Para compreender o que acontece, devemos levar em consideração que o número $\frac{1}{3}=0,\overline{3}$ possui um representação infinita tanto na base decimal quanto na base binária. Logo, sua representação de máquina inclui um erro de arredondamento. Seja ϵ a diferença entre o valor exato de $\frac{1}{3}$ e sua representação de máquina, isto é, $\tilde{x}^{(1)}=\frac{1}{3}+\epsilon$. A sequência efetivamente calculada no computador é:

$$\tilde{x}^{(1)} = \frac{1}{3} + \epsilon \tag{2.157}$$

$$\tilde{x}^{(2)} = 4x^{(1)} - 1 = 4\left(\frac{1}{3} + \epsilon\right) - 1 = \frac{1}{3} + 4\epsilon$$
 (2.158)

$$\tilde{x}^{(3)} = 4x^{(2)} - 1 = 4\left(\frac{1}{3} + 4\epsilon\right) - 1 = \frac{1}{3} + 4^2\epsilon$$
 (2.159)

$$\tilde{x}^{(n)} = \frac{1}{3} + 4^{(n-1)}\epsilon \tag{2.161}$$

Portanto o limite da sequência diverge,

$$\lim_{x \to \infty} |\tilde{x}^{(n)}| = \infty \tag{2.162}$$

Qual o número de condicionamento desse problema?

Exemplo 2.9.2. Observe a seguinte identidade

$$f(x) = \frac{(1+x)-1}{x} = 1 \tag{2.163}$$

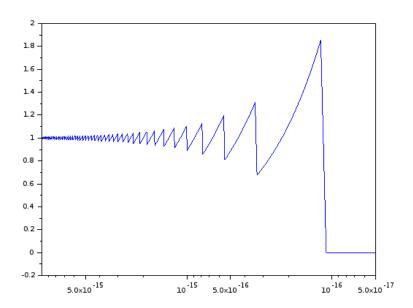


Figure 2.1: Gráfico na função do Exemplo 2.9.2.

Calcule o valor da expressão à esquerda para $x=10^{-12},\ x=10^{-13},\ x=10^{-14},\ x=10^{-15},\ x=10^{-16}$ e $x=10^{-17}$. Observe que quando x se aproxima do ϵ de máquina a expressão perde o significado. Veja a Figura 2.1 com o gráfico de f(x) em escala logarítmica.

Exemplo 2.9.3. Neste exemplo, estamos interessados em compreender mais detalhadamente o comportamento da expressão

$$\left(1 + \frac{1}{n}\right)^n \tag{2.164}$$

quando n é um número grande ao computá-la em sistemas de numeral de ponto flutuante com acurácia finita. Um resultado bem conhecido do cálculo nos diz que o limite de (2.164) quando n tende a infinito é o número de Euler:

$$\lim_{n \to \infty} \left(1 + \frac{1}{n} \right)^n = e = 2,718281828459... \tag{2.165}$$

Sabemos também que a sequência produzida por (2.164) é crescente, isto é:

$$\left(1 + \frac{1}{1}\right)^1 < \left(1 + \frac{1}{2}\right)^2 < \left(1 + \frac{1}{3}\right)^3 < \dots$$
 (2.166)

No entanto, quando calculamos essa expressão no Julia, nos defrontamos com o seguinte resultado:

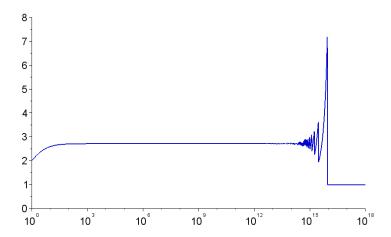


Figure 2.2: Gráfico de $\left(1+\frac{1}{n}\right)^n$ em função de n em escala linear-logarítmica variando de 10^0 até 10^{18} . Veja o Exemplo 2.9.3.

n	$\left(1+\frac{1}{n}\right)^n$	n	$\left(1+\frac{1}{n}\right)^n$
1	2,000000000000000	10^{2}	2,7048138294215
2	2,25000000000000	10^{4}	2,7181459268249
3	2,3703703703704	10^{6}	2,7182804690957
4	2,4414062500000	10^{8}	2,7182817983391
5	2,4883200000000	10^{10}	2,7182820532348
6	2,5216263717421	10^{12}	2,7185234960372
7	2,5464996970407	10^{14}	2,7161100340870
8	2,5657845139503	10^{16}	1,00000000000000
9	2,5811747917132	10^{18}	1,00000000000000
10	2,5937424601000	10^{20}	1,00000000000000

Podemos resumir esses dados no gráfico de $\left(1+\frac{1}{n}\right)^n$ em função de n, veja a Figura 2.9.

Observe que quando n se torna grande, da ordem de 10^{15} , o gráfico da função

Prof. M.e Daniel Cassimiro

deixa de ser crescente e apresenta oscilações. Observe também que a expressão se torna identicamente igual a 1 depois de um certo limiar. Tais fenômenos não são intrínsecos da função $f(n) = (1 + 1/n)^n$, mas <u>oriundas de erros de arredondamento</u>, isto é, são resultados numéricos espúrios. A fim de pôr o comportamento numérico de tal expressão, apresentamos abaixo o gráfico da mesma função, porém restrito à região entre 10^{14} e 10^{16} .

Para compreendermos melhor por que existe um limiar N que, quando atingido torna a expressão do exemplo acima identicamente igual a 1, observamos a sequência de operações realizadas pelo computador:

$$n \to 1/n \to 1 + 1/n \to (1 + 1/n)^n$$
 (2.167)

Devido ao limite de precisão da representação de números em ponto flutuante, existe um menor número representável que é maior do que 1. Este número é 1+eps, onde eps é chamado de **épsilon de máquina** e é o menor número que somado a 1 produz um resultado superior a 1 no sistema de numeração usado. O épsilon de máquina no sistema de numeração **double** vale aproximadamente 2.22×10^{-16} .

No GNU Octave, o épsilon de máquina é a constante eps. Observe que:

>> printf('%1.25f\n', 1+eps)
1.00000000000000002220446049

Quando somamos a 1 um número positivo inferior ao épsilon de máquina, obtemos o número 1. Dessa forma, o resultado obtido pela operação de ponto flutuante 1 + n para $0 < n < 2,22 \times 10^{-16}$ é 1.

Portanto, quando realizamos a sequência de operações dada em (2.167), toda informação contida no número n é perdida na soma com 1 quando 1/n é menor que o épsilon de máquina, o que ocorre quando $n > 5 \times 10^{15}$. Assim, (1+1/n) é aproximado para 1 e a última operação se resume a 1^n , o que é igual a 1 mesmo quando n é grande.

Um erro comum é acreditar que o perda de significância se deve ao fato de 1/n ser muito pequeno para ser representado e é aproximando para 0. Isto é falso, o sistema de ponto de flutuante permite representar números de magnitude muito inferior ao épsilon de máquina. O problema surge da limitação no tamanho da mantissa. Observe como a seguinte sequência de operações não perde significância para números positivos x muito menores que o épsilon de máquina:

$$n \to 1/n \to 1/(1/n)$$
 (2.168)

compare o desempenho numérico desta sequência de operações para valores pequenos de n com o da seguinte sequência:

$$n \to 1 + n \to (1+n) - 1.$$
 (2.169)

Finalmente, notamos que quando tentamos calcular $\left(1+\frac{1}{n}\right)^n$ para n grande, existe perda de significância no cálculo de 1+1/n.

Para entendermos isso melhor, vejamos o que acontece no GNU Octave quando $n=7\times 10^{13}$:

```
>> format('long')
>> n=7e13
n = 70000000000000
>> 1/n
ans = 1.42857142857143e-14
>> y=1+1/n
y = 1.0000000000001
```

Observe a perda de informação ao deslocar a mantissa de 1/n. Para evidenciar o fenômenos, observamos o que acontece quando tentamos recalcular n subtraindo 1 de 1 + 1/n e invertendo o resultado:

```
>> y-1
ans = 1.42108547152020e-14
>> 1/(y-1)
ans = 70368744177664
```

Exemplo 2.9.4 (Analogia da balança). Observe a seguinte comparação interessante que pode ser feita para ilustrar os sistemas de numeração com ponto fixo e flutuante: o sistema de ponto fixo é como uma balança cujas marcas estão igualmente espaçadas; o sistema de ponto flutuante é como uma balança cuja distância entre as marcas é proporcional à massa medida. Assim, podemos ter uma balança de ponto fixo cujas marcas estão sempre distanciadas de 100g (100g, 200g, 300g, ..., 1kg, 1,1kg,...) e outra balança de ponto flutuante cujas marcas estão distanciadas sempre de aproximadamente um décimo do valor lido (100g, 110g, 121g, 133g, ..., 1kg, 1,1kg, 1,21kg, ...) A balança de ponto fixo apresenta uma resolução baixa para pequenas medidas, porém uma resolução alta para grandes medidas. A balança de ponto flutuante distribui a resolução de forma proporcional ao longo da escala.

Seguindo nesta analogia, o fenômeno de perda de significância pode ser interpretado como a seguir: imagine que você deseje obter o peso de um gato (aproximadamente 4kg). Dois processos estão disponíveis: colocar o gato diretamente na balança ou medir seu peso com o gato e, depois, sem o gato. Na balança de ponto flutuante, a incerteza associada à medida do peso do gato (sozinho) é aproximadamente 10% de 4kg, isto é, 400g. Já a incerteza associada à medida da uma pessoa (aproximadamente 70kg) com o gato é de 10% do peso total, isto é, aproximadamente 7kg. Esta incerteza é da mesma ordem de grandeza da medida a ser realizada, tornado o processo impossível de ser realizado, já que teríamos uma incerteza da ordem de 14kg (devido à dupla medição) sobre uma grandeza de 4kg.

Exercícios resolvidos

ER 2.9.1. Deseja-se medir a concentração de dois diferentes oxidantes no ar. Três sensores eletroquímicos estão disponíveis para a medida e apresentam a seguintes respostas:

$$v_1 = 270[A] + 30[B], \quad v_2 = 140[A] + 20[B] \quad e \quad v_3 = 15[A] + 200[B] \quad (2.170)$$

as tensões v_1, v_2 e v_3 são dadas em mV e as concentrações em milimol/l.

a) Encontre uma expressão para os valores de [A] e [B] em termos de v_1 e v_2 e, depois, em termos de v_1 e v_3 . Dica: Se $ad \neq bc$, então a matriz A dada por

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \tag{2.171}$$

é inversível e sua inversa é dada por

$$A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}. \tag{2.172}$$

b) Sabendo que incerteza relativa associada às sensibilidades dos sensores 1 e 2 é de 2% e que a incerteza relativa associada às sensibilidades do sensor 3 é 10%, verifique a incerteza associada à medida feita com o par 1-2 e o par 1-3. Use [A] = [B] = 10 milimol/l. Dica: Você deve diferenciar as grandezas [A] e [B] em relação aos valores das tensões.

Solução. Em ambos casos, temos a seguinte estrutura:

$$\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [A] \\ [B] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$$
 (2.173)

De forma que

$$\begin{bmatrix} [A] \\ [B] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \begin{bmatrix} S_{22} & -S_{12} \\ -S_{21} & S_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$$
(2.174)

Portanto

$$[A] = \frac{S_{22}v_1 - S_{12}v_2}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}}$$

$$[B] = \frac{-S_{21}v_1 + S_{11}v_2}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}}$$

$$(2.175)$$

$$[B] = \frac{-S_{21}v_1 + S_{11}v_2}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} (2.176)$$

Usando derivação logarítmica, temos

$$\frac{1}{[A]}\frac{\partial[A]}{\partial S_{11}} = -\frac{S_{22}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \tag{2.177}$$

$$\frac{1}{[A]}\frac{\partial[A]}{\partial S_{12}} = -\frac{v_2}{S_{22}v_1 - S_{12}v_2} + \frac{S_{21}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}}$$
(2.178)

$$= -\frac{[A]}{[B]} \cdot \frac{S_{22}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \tag{2.179}$$

$$\frac{1}{[A]}\frac{\partial[A]}{\partial S_{21}} = \frac{S_{12}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \tag{2.180}$$

$$\frac{1}{[A]}\frac{\partial[A]}{\partial S_{22}} = \frac{v_1}{S_{22}v_1 - S_{12}v_2} - \frac{S_{11}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}}$$
(2.181)

$$= \frac{[A]}{[B]} \cdot \frac{S_{12}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \tag{2.182}$$

е

$$\frac{1}{|B|} \frac{\partial [B]}{\partial S_{11}} = \frac{v_2}{-S_{21}v_1 + S_{11}v_2} - \frac{S_{22}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}}$$
(2.183)

$$= \frac{[B]}{[A]} \frac{S_{21}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \tag{2.184}$$

$$\frac{1}{[B]} \frac{\partial [B]}{\partial S_{12}} = \frac{S_{21}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \tag{2.185}$$

$$\frac{1}{[B]} \frac{\partial [B]}{\partial S_{21}} = -\frac{v_1}{-S_{21}v_1 + S_{11}v_2} + \frac{S_{21}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}}$$
(2.186)

$$= -\frac{[B]}{[A]} \frac{S_{11}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}}$$
 (2.187)

$$\frac{1}{[B]} \frac{\partial [B]}{\partial S_{22}} = -\frac{S_{11}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \tag{2.188}$$

(2.189)

E o erro associado às medidas pode ser aproximado por

$$\frac{1}{[A]}\delta_{[A]} = \left| \frac{1}{[A]} \frac{\partial [A]}{\partial S_{11}} \right| \delta_{S_{11}} + \left| \frac{1}{[A]} \frac{\partial [A]}{\partial S_{12}} \right| \delta_{S_{12}}$$
(2.190)

$$+ \left| \frac{1}{[A]} \frac{\partial [A]}{\partial S_{21}} \right| \delta_{S_{21}} + \left| \frac{1}{[A]} \frac{\partial [A]}{\partial S_{22}} \right| \delta_{S_{22}}$$
 (2.191)

$$= \frac{1}{|\det S|} \left[S_{22} \delta_{S_{11}} + \frac{[A]}{[B]} S_{22} \delta_{S_{12}} + S_{12} \delta_{S_{21}} + \frac{[A]}{[B]} S_{12} \delta_{S_{22}} \right] (2.192)$$

Analogamente, temos:

$$\frac{1}{|B|}\delta_{[B]} = \frac{1}{|\det S|} \left[\frac{[B]}{[A]} S_{21}\delta_{S_{11}} + S_{21}\delta_{S_{11}} + \frac{[B]}{[A]} S_{11}\delta_{S_{21}} + S_{11}\delta_{S_{22}} \right] (2.193)$$

onde não se indicou $|S_{ij}|$ nem |[.]| pois são todos positivos.

Fazemos agora a aplicação numérica:

Caso do par 1-2:

$$\det S = \begin{vmatrix} 270 & 30 \\ 140 & 20 \end{vmatrix} = 1200 \tag{2.194}$$

$$\frac{1}{[A]}\delta_{[A]} = \frac{1}{1200} \left[20 \times 270 \times 2\% + 20 \times 30 \times 2\% \right] \tag{2.195}$$

$$+30 \times 140 \times 2\% + 30 \times 20 \times 2\%$$
] (2.196)

$$= \frac{216}{1200} = 0.18 = 18\% \tag{2.197}$$

$$\frac{1}{[B]}\delta_{[B]} = \frac{1}{1200} \left[140 \times 270 \times 2\% + 140 \times 30 \times 2\% \right] \tag{2.198}$$

$$+270 \times 140 \times 2\% + 270 \times 20 \times 2\%$$
 (2.199)

$$+270 \times 140 \times 2\% + 270 \times 20 \times 2\%]$$

$$= \frac{426}{1200} = 0.355 = 35.5\%$$
(2.199)

Caso do par 1-3:

$$\det S = \begin{vmatrix} 270 & 30 \\ 15 & 200 \end{vmatrix} = 53550 \tag{2.201}$$

$$\frac{1}{[A]}\delta_{[A]} = \frac{1}{53550} \left[200 \times 270 \times 2\% + 200 \times 30 \times 2\% \right] \tag{2.202}$$

$$+30 \times 15 \times 10\% + 30 \times 200 \times 10\%$$
 (2.203)

$$= \frac{1804.6}{52550} \approx 0.0337 = 3.37\% \tag{2.204}$$

$$\frac{1}{[B]}\delta_{[B]} = \frac{1}{53550} \left[15 \times 270 \times 2\% + 15 \times 30 \times 2\% \right] \tag{2.205}$$

$$+270 \times 15 \times 10\% + 270 \times 200 \times 10\%$$
 (2.206)

$$= \frac{5895}{53550} \approx 0.11 = 11\% \tag{2.207}$$

Conclusão, apesar de o sensor 3 apresentar uma incerteza cinco vezes maior na sensibilidade, a escolha do sensor 3 para fazer par ao sensor 1 parece mais adequada.

Exercícios

E 2.9.1. Considere as expressões:

$$\frac{\exp(1/\mu)}{1 + \exp(1/\mu)} \tag{2.208}$$

е

$$\frac{1}{\exp(-1/\mu) + 1} \tag{2.209}$$

com $\mu > 0$. Verifique que elas são idênticas como funções reais. Teste no computador cada uma delas para $\mu = 0.1$, $\mu = 0.01$ e $\mu = 0.001$. Qual dessas expressões é mais adequada quando μ é um número pequeno? Por quê?

E 2.9.2. Encontre expressões alternativas para calcular o valor das seguintes funções quando x é próximo de zero.

a)
$$f(x) = \frac{1 - \cos(x)}{x^2}$$

b)
$$g(x) = \sqrt{1+x} - 1$$

c)
$$h(x) = \sqrt{x + 10^6} - 10^3$$

d)
$$i(x) = \sqrt{1 + e^x} - \sqrt{2}$$
 Dica: Faça $y = e^x - 1$

E 2.9.3. Use uma identidade trigonométrica adequada para mostrar que:

$$\frac{1 - \cos(x)}{x^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{\sin(x/2)}{x/2} \right)^2. \tag{2.210}$$

Analise o desempenho destas duas expressões no computador quando x vale 10^{-5} , 10^{-6} , 10^{-7} , 10^{-8} , 10^{-9} , 10^{-200} e 0. Discuta o resultado. **Dica:** Para $|x| < 10^{-5}$, f(x) pode ser aproximada por $1/2 - x^2/24$ com erro de truncamento inferior a 10^{-22} .

E 2.9.4. Reescreva as expressões:

$$\sqrt{e^{2x} + 1} - e^x$$
 e $\sqrt{e^{2x} + x^2} - e^x$ (2.211)

de modo que seja possível calcular seus valores para x=100 utilizando a aritmética de ponto flutuante ("Double") no computador.

E 2.9.5. Na teoria da relatividade restrita, a energia cinética de uma partícula e sua velocidade se relacionam pela seguinte fórmula:

$$E = mc^{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^{2}}} - 1 \right), \tag{2.215}$$

onde E é a energia cinética da partícula, m é a massa de repouso, v o módulo da velocidade e c a velocidade da luz no vácuo dada por c=299792458m/s. Considere que a massa de repouso $m=9,10938291\times 10^{-31}kg$ do elétron seja conhecida com erro relativo de 10^{-9} . Qual é o valor da energia e o erro relativo associado a essa grandeza quando $v=0,1c,\ v=0,5c,\ v=0,99c$ e v=0,999c sendo que a incerteza relativa na medida da velocidade é 10^{-5} ?

Chapter 3

Interpolação

Neste capítulo, discutimos os problemas de **interpolação**. Mais precisamente, dada uma sequência de n reais $x_1 < x_2 < \ldots < x_n$, um conjunto de pontos $\{(x_i, y_i) \in I \times \mathbb{R}\}_{i=1}^n$, onde $I = [x_1, x_n]$ e uma família de funções $\mathcal{F}_I = \{\varphi : I \to \mathbb{R}\}$, o problema de interpolação consiste em encontrar alguma função $f \in \mathcal{F}_I$ tal que

$$f(x_i) = y_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$
 (3.1)

Chamamos uma tal f de **função interpoladora** dos pontos dados. Ou ainda, dizemos que f interpola os pontos dados.

Exemplo 3.0.1. Um dos problemas de interpolação mais simples é o de encontrar a equação da reta que passa por dois pontos dados. Por exemplo, sejam dados o conjunto de pontos $\{(1,1),(2,2)\}$ e a família de funções $\mathcal{F}_{[1,2]}$:

$$\mathcal{F}_{[1,2]} = \{ f : [1,2] \to \mathbb{R} ; [1,2] \ni x \mapsto f(x) = a + bx; a,b \in \mathbb{R} \}.$$
 (3.2)

Para que uma f na família seja a função interpoladora do conjunto de pontos dados, precisamos que

$$a + bx_1 = y_1$$
 $a + b = 1$
 $a + bx_2 = y_2$ $a + 2b = 2$ (3.3)

o que nos fornece a=0 e b=1. Então, a função interpoladora f é tal que f(x)=x para um $x\in[1,2]$. Os pontos e a reta interpolada estão esboçados na Figura 3.1.

Um problema de interpolação cuja família de funções constitui-se de polinômios é chamado de problema de interpolação polinomial.



Figure 3.1: Exemplo de interpolação de dois pontos por uma reta, veja o Exemplo 3.0.1.

3.1 Interpolação polinomial

Interpolação polinomial é um caso particular do problema geral de interpolação, no qual a família de funções é constituída de polinômios. A escolha de polinômios como funções interpolantes é natural por diversos motivos, entre eles: se p é um polinômio de grau n, o valor p(x) para um x real é calculado através de n+1 operações de multiplicação e n+1 operações de adição. Para tanto, pode-se usar o algoritmo de Horner¹. Dado um polinômio p de grau n da forma

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k,$$
 (3.4)

é possível reescrevê-lo como a sequência de operações dada por

$$a_0 + x (a_1 + x (a_2 + x (... + x (a_{n-1} + x a_n)...))).$$
 (3.5)

Também, derivadas e primitivas de polinômios são também polinômios cuja relação algébrica com o original é simples. Além disso, o teorema da aproximação de Weierstrass estabelece que qualquer função contínua definida em um intervalo fechado pode ser aproximada uniformemente por um polinômio tão bem quanto se queira.

Teorema 3.1.1 (Weierstrass). Seja f uma função contínua definida no intervalo fechado [a,b] e seja δ um número positivo. Então existe um polinômio p, tal que para todo $x \in [a,b]$,

$$|f(x) - p(x)| < \delta. \tag{3.6}$$

¹William George Horner, 1786 - 1837, matemático britânico.

Observe que para o problema ser bem determinado, é necessário restringirmos o grau dos polinômios. Dado um conjunto de n pontos a serem interpolados $\{(x_i,y_i)\}_{i=1}^n, x_i \neq x_j \text{ para } i \neq j$, a família de polinômios $\mathcal{F} = \mathbb{P}_{n-1}$ deve ser escolhida, onde:

$$\mathbb{P}_{n-1} := \left\{ p : x \mapsto p(x) = \sum_{k=0}^{n-1} a_k x^k; \{a_0, a_1, \dots, a_{n-1}\} \in \mathbb{R} \right\}, \tag{3.7}$$

isto é, a família dos polinômios reais de grau menor ou igual a n-1.

O Exemplo 3.0.1 discute um dos casos mais simples de interpolação polinomial, o qual consiste em interpolar uma reta por dois pontos. Neste caso, a família de funções consiste de polinômios de grau 1. Se buscarmos interpolar uma parábola pelos dois pontos dados, o problema fica subdeterminado, pois existem infinitas parábolas que passam por dois pontos dados. Além disso, se buscarmos interpolar uma reta por três pontos dados, o problema estaria sobredeterminado e poderia não ter solução se os pontos não fossem colineares. Veja o Exercício 3.1.1.

Assim, dado um conjunto com n pontos $\{(x_i,y_i)\}_{i=1}^n$, chamamos de **polinômio** interpolador o polinômio de grau menor ou igual a n-1 que os interpola.

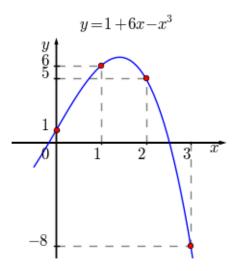


Figure 3.2: Polinômio interpolador do conjunto de pontos $\{(0,1), (1,6), (2,5), (3,-8)\}$. Veja o Exemplo 3.1.1.

Exemplo 3.1.1. Encontre o polinômio interpolador do conjunto de pontos $\{(0,1), (1,6), (2,5), (3,-8)\}.$

Solução. Como o conjunto consiste de 4 pontos, o polinômio interpolador deve ser da forma:

$$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3. (3.8)$$

As condições de interpolação são $p(x_i) = y_i$, i = 0, 1, 2, 3, o que nos leva ao sistema linear:

$$a_{0} = 1$$

$$a_{0} + a_{1} + a_{2} + a_{3} = 6$$

$$a_{0} + 2a_{1} + 4a_{2} + 8a_{3} = 5$$

$$a_{0} + 3a_{1} + 9a_{2} + 27a_{3} = -8$$

$$(3.9)$$

cuja solução é $a_0 = 1$, $a_1 = 6$, $a_2 = 0$ e $a_3 = -1$. Portanto, o polinômio interpolador é $p(x) = 1 + 6x - x^3$. Veja Figura 3.2.

No Scilab, podemos encontrar o polinômio interpolador e esboçar seu gráfico com os seguintes comandos:

```
-->xi = [0 1 2 3]';

-->yi = [1 6 5 -8]';

-->A = [xi.^0 xi.^1 xi.^2 xi.^3];

-->a = A\yi;

-->p = poly(a,'x','c')

p =

3

1 + 6x - x

-->xx = linspace(-0.5,3.25);

-->plot(xi,yi,'ro',xx,horner(p,xx),'b-');xgrid
```

Teorema 3.1.2. Seja $\{(x_i,y_i)\}_{i=1}^n$ um conjunto de n pares ordenados de números reais tais que $x_i \neq x_j$ se $i \neq j$, então existe um único polinômio p(x) de grau n-1 ou inferior que passa por todos os pontos dados, isto é, $p(x_i) = y_i$, $i = 1, \ldots, n$.

Proof. Observe que o problema de encontrar os coeficientes $a_0, a_1, \ldots, a_{n-1}$ do polinômio

$$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_{n-1} x^{n-1} = \sum_{k=0}^{n-1} a_k x^k$$
 (3.10)

 \Diamond

tal que $p(x_i) = y_i$ é equivalente a resolver o sistema linear com n equações e n incógnitas dado por

$$a_{0} + a_{1}x_{1} + a_{1}x_{1}^{2} + \dots + a_{n-1}x_{1}^{n-1} = y_{1},$$

$$a_{0} + a_{1}x_{2} + a_{2}x_{2}^{2} + \dots + a_{n-1}x_{2}^{n-1} = y_{2},$$

$$\vdots$$

$$a_{0} + a_{1}x_{n} + a_{2}x_{n}^{2} + \dots + a_{n-1}x_{n}^{n-1} = y_{n}.$$

$$(3.11)$$

O qual pode ser escrito na forma matricial como

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{n-1} \\ 1 & x_3 & x_3^2 & \cdots & x_3^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

$$(3.12)$$

A matriz envolvida é uma **matriz de Vandermonde**² de ordem n cujo determinante é dado pelo produtório duplo

$$\prod_{1 \le i < j \le n} (x_j - x_i) \tag{3.13}$$

É fácil ver que se as abscissas são diferentes dois a dois, então o determinante é não nulo. Disto decorre que a matriz envolvida é inversível e, portanto, o sistema possui uma solução que é única.

Esta abordagem direta que usamos no Exemplo 3.1.1 e na demonstração do Teorema 3.1.2 se mostra ineficiente quando o número de pontos é grande e quando existe grande variação nas abscissas. Neste caso, a matriz de Vandermonde é mal condicionada (ver [?]), o que acarreta um aumento dos erros de arredondamento na solução do sistema.

Uma maneira de resolver este problema é escrever o polinômio em uma base que produza um sistema bem condicionado.

Exercícios resolvidos

Esta seção carece de exercícios resolvidos. Participe da sua escrita.

Veja como em:

https://github.com/livroscolaborativos/CalculoNumerico

ER 3.1.1. Mostre que:

- a) Existem infinitas parábolas que interpolam dois pontos dados $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2)\}$, com $x_1 \neq x_2$.
- b) Não existe reta que interpola os pontos $\{(1,1),(2,2,1),(3,3)\}$.

²Alexandre-Théophile Vandermonde, 1735 - 1796, matemático francês.

c) Não existe parábola de equação $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ que interpola dois pontos dados $\{(x_1, y_1), (x_1, y_2)\}$, com $y_1 \neq y_2$. Mas, existem infinitas parábolas de equação $x = a_0 + a_1 y + a_2 y^2$ que interpolam estes pontos.

Solução. a) Uma parábola de equação $y = a_1 + a_2x + a_3x^2$ que interpola os pontos deve satisfazer o sistema:

$$a_1 + a_2 x_1 + a_3 x_1^2 = y_1$$

$$a_1 + a_2 x_2 + a_3 x_2^2 = y_2$$
(3.14)

Sem perda de generalidade, para cada $a_3 \in \mathbb{R}$ dado, temos:

$$a_1 + a_2 x_1 = y_1 - a_3 x_1^2 a_1 + a_2 x_2 = y_2 - a_3 x_2^2,$$
(3.15)

o qual tem solução única, pois $x_1 \neq x_2$. Ou seja, para cada $a_3 \in \mathbb{R}$ dado, existem $a_1, a_2 \in \mathbb{R}$ tais que a parábola de equação $y = a_1 + a_2x + a_3x^2$ interpola os pontos dados.

b) Certamente não existem retas de equação x = a que interpolam os pontos dados. Consideremos então retas de equação $y = a_1 + a_2 x$. Para uma tal reta interpolar os pontos dados é necessário que:

$$a_1 + a_2 = 1$$

 $a_1 + 2a_2 = 2,1,$ (3.16)
 $a_1 + 3a_2 = 3$

o qual é um sistema impossível.

c) Não existe uma parábola de equação $y=a_1+a_2x+a_3x^2$ que interpole os pontos dados, pois tal equação determina uma função de x em y. Agora, para mostrar que existem infinitas parábolas de equação $x=a_1+a_2y+a_3y^2$ que interpolam os pontos dados, basta seguir um raciocínio análogo ao do item a), trocando x por y e y por x.



Exercícios

Esta seção carece de exercícios. Participe da sua escrita.

Veja como em:

https://github.com/livroscolaborativos/CalculoNumerico

E 3.1.1. Encontre o polinômio interpolador para o conjunto de pontos $\{(-2, -47), (0, -3), (1, 4), (2, 41)\}$. Então, faça um gráfico com os pontos e o polinômio interpolador encontrado.

E 3.1.2. Encontre o polinômio interpolador para o conjunto de pontos $\{(-1, 1, 25), (0,5,0,5), (1,1,25), (1,25,1,8125)\}.$

3.2 Diferenças divididas de Newton

Dado um conjunto com n pontos $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$, o **método das diferenças** divididas de Newton consiste em construir o polinômio interpolador da forma

$$p(x) = a_1 + a_2(x - x_1) + a_3(x - x_1)(x - x_2) + \cdots + a_n(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_{n-1}).$$
(3.17)

Como $p(x_i) = y_i$, i = 1, 2, ..., n, os coeficientes a_i satisfazem o seguinte sistema triangular inferior:

$$a_{1} = y_{1}$$

$$a_{1} + a_{2}(x_{2} - x_{1}) = y_{2}$$

$$a_{1} + a_{2}(x_{3} - x_{1}) + a_{3}(x_{3} - x_{1})(x_{3} - x_{2}) = y_{3}$$

$$\vdots$$

$$a_{1} + a_{2}(x_{n} - x_{1}) + \dots + a_{n}(x_{n} - x_{1}) \cdots (x_{n} - x_{n-1}) = y_{n}$$

$$(3.18)$$

Resolvendo de cima para baixo, obtemos

$$a_{1} = y_{1}$$

$$a_{2} = \frac{y_{2} - a_{1}}{x_{2} - x_{1}} = \frac{y_{2} - y_{1}}{x_{2} - x_{1}}$$

$$a_{3} = \frac{y_{3} - a_{2}(x_{3} - x_{1}) - a_{1}}{(x_{3} - x_{1})(x_{3} - x_{2})} = \frac{\frac{y_{3} - y_{2}}{(x_{3} - x_{2})} - \frac{y_{2} - y_{1}}{(x_{2} - x_{1})}}{(x_{3} - x_{1})}$$

$$(3.19)$$

Note que os coeficientes são obtidos por diferenças das ordenadas divididas por diferenças das abscissas dos pontos dados. Para vermos isso mais claramente,

Table 3.1: Esquema de diferenças divididas para um conjunto com três pontos $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^3$.

introduzimos a seguinte notação:

$$f[x_j] := y_j \tag{3.20}$$

$$f[x_j, x_{j+1}] := \frac{f[x_{j+1}] - f[x_j]}{x_{j+1} - x_j}$$
(3.21)

$$f[x_j] := y_j$$

$$f[x_j, x_{j+1}] := \frac{f[x_{j+1}] - f[x_j]}{x_{j+1} - x_j}$$

$$f[x_j, x_{j+1}, x_{j+2}] := \frac{f[x_{j+1}, x_{j+2}] - f[x_j, x_{j+1}]}{x_{j+2} - x_j}$$

$$\vdots$$

$$(3.20)$$

$$(3.21)$$

$$\vdots (3.23)$$

$$f[x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+k}] := \frac{f[x_{j+1}, x_{j+2}, \dots, x_{j+k}] - f[x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+k-1}]}{x_{j+k} - x_j} (3.23)$$

Chamamos $f[x_i]$ de diferença dividida de ordem zero (ou primeira diferença dividida), $f[x_i,x_j+1]$ de diferença dividida de ordem 1 (ou segunda diferença dividida) e assim por diante.

Uma inspeção cuidadosa dos coeficientes obtidos em (3.19) nos mostra que

$$a_k = f[x_1, x_2, \dots, x_k]$$
 (3.25)

Isto nos permite esquematizar o método conforme apresentado na Tabela 3.1.

Exemplo 3.2.1. Use o método de diferenças divididas para encontrar o polinômio que passe pelos pontos (-1,3),(0,1),(1,3),(3,43).

Solução. Usando o esquema apresentado na Tabela 3.1, obtemos

Portanto, o polinômio interpolador do conjunto de pontos dados é

$$p(x) = 3 - 2(x+1) + 2(x+1)x + (x+1)x(x-1)$$
(3.26)

ou, equivalentemente, $p(x) = x^3 + 2x^2 - x + 1$.

\Diamond

3.3 Polinômios de Lagrange

Outra maneira clássica de resolver o problema da interpolação polinomial é através dos polinômios de Lagrange. Dado um conjunto de pontos $\{x_j\}_{j=1}^n$ distintos dois a dois, definimos os polinômios de Lagrange como os polinômios de grau n-1 que satisfazem

$$L_k(x_j) = \begin{cases} 1, & \text{se } k = j \\ 0, & \text{se } k \neq j \end{cases}$$
 (3.27)

Assim, o polinômio p(x) de grau n-1 que interpola os pontos dados, isto é, $p(x_j) = y_j, j = 1, \dots, n$ é dado por

$$p(x) = y_1 L_1(x) + y_2 L_2(x) + \dots + y_n L_n(x) = \sum_{k=1}^n y_k L_k(x).$$
 (3.28)

Para construir os polinômios de Lagrange, podemos analisar a sua forma fatorada, ou seja:

$$L_k(x) = c_k \prod_{\substack{j=1\\ j \neq k}}^n (x - x_j)$$
 (3.29)

onde o coeficiente c_k é obtido da condição $L_k(x_k) = 1$:

$$L_k(x_k) = c_k \prod_{\substack{j=1\\j\neq k}}^n (x_k - x_j) \Longrightarrow c_k = \frac{1}{\prod_{\substack{j=1\\j\neq k}}^n (x_k - x_j)}$$
(3.30)

Portanto,

$$L_k(x) = \prod_{\substack{j=1\\j\neq k}}^n \frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)}$$
(3.31)

Observação 3.3.1. O problema de interpolação quando escrito usando como base os polinômios de Lagrange produz um sistema linear diagonal.

Exemplo 3.3.1. Encontre o polinômio da forma $p(x) = a_1 + a_2x + a_3x^2 + a_4x^3$ que passa pelos pontos (0,0), (1,1), (2,4), (3,9).

Solução. Escrevemos:

$$L_1(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(0-1)(0-2)(0-3)} = -\frac{1}{6}x^3 + x^2 - \frac{11}{6}x + 1$$
 (3.32)

$$L_2(x) = \frac{x(x-2)(x-3)}{1(1-2)(1-3)} = \frac{1}{2}x^3 - \frac{5}{2}x^2 + 3x$$
 (3.33)

$$L_3(x) = \frac{x(x-1)(x-3)}{2(2-1)(2-3)} = -\frac{1}{2}x^3 + 2x^2 - \frac{3}{2}x$$
 (3.34)

$$L_4(x) = \frac{x(x-1)(x-2)}{3(3-1)(3-2)} = \frac{1}{6}x^3 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x$$
 (3.35)

Assim, temos:

$$P(x) = 0 \cdot L_1(x) + 1 \cdot L_2(x) + 4 \cdot L_3(x) + 9 \cdot L_4(x) = x^2$$
(3.36)

 \Diamond

3.4 Aproximação de funções reais por polinômios interpoladores

Teorema 3.4.1. Dados n+1 pontos distintos, x_0, x_1, \dots, x_n , dentro de um intervalo [a,b] e uma função f com n+1 derivadas contínuas nesse intervalo $(f \in C^{n+1}[a,b])$, então para cada x em [a,b], existe um número $\xi(x)$ em (a,b) tal que

$$f(x) = P(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n), \tag{3.37}$$

onde P(x) é o polinômio interpolador. Em especial, pode-se dizer que

$$|f(x) - P(x)| \le \frac{M}{(n+1)!} |(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)|,$$
 (3.38)

onde

$$M = \max_{x \in [a,b]} |f^{(n+1)}(\xi(x))| \tag{3.39}$$

Exemplo 3.4.1. Considere a função $f(x) = \cos(x)$ e o polinômio P(x) de grau 2 tal que $P(0) = \cos(0) = 1$, $P(\frac{1}{2}) = \cos(\frac{1}{2})$ e $P(1) = \cos(1)$. Use a fórmula de Lagrange para encontrar P(x). Encontre o erro máximo que se assume ao aproximar o valor de $\cos(x)$ pelo de P(x) no intervalo [0,1]. Trace os gráficos de f(x) e P(x) no intervalo [0,1] no mesmo plano cartesiano e, depois, trace o gráfico da diferença $\cos(x) - P(x)$. Encontre o erro efetivo máximo $|\cos(x) - P(x)|$.

Solução. Usando polinômios de Lagrange, obtemos

$$P(x) = 1 \frac{(x - \frac{1}{2})(x - 1)}{(0 - \frac{1}{2})(0 - 1)}$$

$$+ \cos\left(\frac{1}{2}\right) \frac{(x - 0)(x - 1)}{(\frac{1}{2} - 0)(\frac{1}{2} - 1)}$$

$$+ \cos(1) \frac{(x - 0)(x - \frac{1}{2})}{(1 - 0)(1 - \frac{1}{2})}$$

$$\approx 1 - 0.0299720583066x - 0.4297256358252x^{2}$$

$$(3.41)$$

No Scilab, podemos computar o polinômio interpolador da seguinte forma:

```
L1=poly([.5 1],'x');L1=L1/horner(L1,0)
L2=poly([0 1],'x');L2=L2/horner(L2,0.5)
L3=poly([0 .5],'x');L3=L3/horner(L3,1)
P=L1+cos(.5)*L2+cos(1)*L3
x=[0:.05:1]
plot(x,cos)
plot(x,horner(P,x),'red')
plot(x,horner(P,x)-cos(x))
```

Para estimar o erro máximo, precisamos estimar a derivada terceira de f(x):

$$|f'''(x)| = |\operatorname{sen}(x)| \le \operatorname{sen}(1) < 0.85$$
 (3.42)

e, assim,

$$\max_{x \in [0,1]} \left| x \left(x - \frac{1}{2} \right) (x - 1) \right|. \tag{3.43}$$

O polinômio de grau três $Q(x) = x\left(x - \frac{1}{2}\right)(x - 1)$ tem um mínimo (negativo) em $x_1 = \frac{3+\sqrt{3}}{6}$ e um máximo (positivo) em $x_2 = \frac{3-\sqrt{3}}{6}$. Logo:

$$\max_{x \in [0,1]} \left| x \left(x - \frac{1}{2} \right) (x - 1) \right| \le \max\{ |Q(x_1)|, |Q(x_2)| \} \approx 0.0481125.$$
 (3.44)

Portanto:

$$|f(x) - P(x)| < \frac{0.85}{3!} 0.0481125 \approx 0.0068159 < 7 \cdot 10^{-3}$$
 (3.45)

Para estimar o erro efetivo máximo, basta encontrar o máximo de $|P(x) - \cos(x)|$. O mínimo (negativo) de $P(x) - \cos(x)$ acontece em $x_1 = 4,29 \cdot 10^{-3}$ e o máximo (positivo) acontece em $x_2 = 3,29 \cdot 10^{-3}$. Portanto, o erro máximo efetivo é $4,29 \cdot 10^{-3}$.

Exemplo 3.4.2. Considere o problema de aproximar o valor da integral $\int_0^1 f(x)dx$ pelo valor da integral do polinômio P(x) que coincide com f(x) nos pontos $x_0 = 0$, $x_1 = \frac{1}{2}$ e $x_2 = 1$. Use a fórmula de Lagrange para encontrar P(x). Obtenha o valor de $\int_0^1 P(x)dx$ e encontre uma expressão para o erro de truncamento.

O polinômio interpolador de f(x) é

$$P(x) = f(0)\frac{\left(x - \frac{1}{2}\right)(x - 1)}{\left(0 - \frac{1}{2}\right)(0 - 1)} + f\left(\frac{1}{2}\right)\frac{\left(x - 0\right)(x - 1)}{\left(\frac{1}{2} - 0\right)\left(\frac{1}{2} - 1\right)} + f(1)\frac{\left(x - 0\right)\left(x - \frac{1}{2}\right)}{\left(1 - 0\right)\left(1 - \frac{1}{2}\right)}46)$$

$$= f(0)(2x^2 - 3x + 1) + f\left(\frac{1}{2}\right)(-4x^2 + 4x) + f(1)(2x^2 - x)$$
(3.47)

e a integral de P(x) é:

$$\int_{0}^{1} P(x)dx = \left[f(0) \left(\frac{2}{3}x^{3} - \frac{3}{2}x^{2} + x \right) \right]_{0}^{1} + \left[f\left(\frac{1}{2} \right) \left(-\frac{4}{3}x^{3} + 2x^{2} \right) \right]_{0}^{1} \quad (3.48)$$

$$+ \left[f(1) \left(\frac{2}{3}x^{3} - \frac{1}{2}x^{2} \right) \right]_{0}^{1} \quad (3.49)$$

$$= f(0) \left(\frac{2}{3} - \frac{3}{2} + 1 \right) + f\left(\frac{1}{2} \right) \left(-\frac{4}{3} + 2 \right) + f(1) \left(\frac{2}{3} - \frac{1}{2} \right) (3.50)$$

$$= \frac{1}{6} f(0) + \frac{2}{3} f\left(\frac{1}{2} \right) + \frac{1}{6} f(1) \quad (3.51)$$

Para fazer a estimativa de erro usando o Teorema 3.4.1 e temos

$$\left| \int_0^1 f(x)dx - \int_0^1 P(x)dx \right| = \left| \int_0^1 f(x) - P(x)dx \right|$$
 (3.52)

$$\leq \int_0^1 |f(x) - P(x)| dx \tag{3.53}$$

$$\leq \frac{M}{6} \int_0^1 \left| x \left(x - \frac{1}{2} \right) (x - 1) \right| dx \tag{3.54}$$

$$= \frac{M}{6} \left[\int_0^{1/2} x \left(x - \frac{1}{2} \right) (x - 1) dx \right]$$
 (3.55)

$$- \int_{1/2}^{1} x \left(x - \frac{1}{2} \right) (x - 1) dx$$
 (3.56)

$$= \frac{M}{6} \left[\frac{1}{64} - \left(-\frac{1}{64} \right) \right] = \frac{M}{192}.$$
 (3.57)

Lembramos que $M = \max_{x \in [0,1]} |f'''(x)|$.

Observação 3.4.1. Existem estimativas melhores para o erro de truncamento para este esquema de integração numérica. Veremos com mais detalhes tais esquemas na teoria de integração numérica.

Exemplo 3.4.3. Use o resultado do exemplo anterior para aproximar o valor das seguintes integrais:

a)
$$\int_0^1 \ln(x+1)dx$$

b)
$$\int_{0}^{1} e^{-x^{2}} dx$$

Solução. Usando a fórmula obtida, temos que

$$\int_0^1 \ln(x+1)dx \approx 0.39 \pm \frac{1}{96}$$
 (3.58)

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx 0.75 \pm \frac{3.87}{192} \tag{3.59}$$

 \Diamond

Exercícios

E 3.4.1. Use as mesmas técnicas usadas o resultado do Exemplo 3.4.2 para obter uma aproximação do valor de:

$$\int_0^1 f(x)dx \tag{3.60}$$

através do polinômio interpolador que coincide com f(x) nos pontos x = 0 e x = 1.

3.5 Interpolação linear segmentada

Considere o conjunto $(x_i,y_i)_{j=1}^n$ de n pontos. Assumiremos que $x_{i+1} > x_i$, ou seja, as abscissas são distintas e estão em ordem crescente. A função linear que interpola os pontos x_i e x_{i+1} no intervalo i é dada por

$$P_i(x) = y_i \frac{(x_{i+1} - x)}{(x_{i+1} - x_i)} + y_{i+1} \frac{(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)}$$
(3.61)

O resultado da interpolação linear segmentada é a seguinte função contínua definida por partes no intervalo $[x_1,x_n]$:

$$f(x) = P_i(x), \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$
 (3.62)

Exemplo 3.5.1. Construa uma função linear por partes que interpola os pontos (0,0), (1,4), (2,3), (3,0), (4,2), (5,0).

A função procurada pode ser construída da seguinte forma:

$$f(x) = \begin{cases} 0\frac{x-1}{0-1} + 1\frac{x-0}{1-0}, & 0 \le x < 1\\ 4\frac{x-2}{1-2} + 3\frac{x-1}{2-1}, & 1 \le x < 2\\ 3\frac{x-3}{2-3} + 0\frac{x-2}{3-2}, & 2 \le x < 3\\ 0\frac{x-4}{3-4} + 2\frac{x-3}{4-3}, & 3 \le x < 4\\ 2\frac{x-5}{4-5} + 0\frac{x-4}{5-4}, & 4 \le x \le 5 \end{cases}$$
(3.63)

Simplificando, obtemos:

$$f(x) = \begin{cases} x, & 0 \le x < 1 \\ -x + 5, & 1 \le x < 2 \\ -3x + 9, & 2 \le x < 3 \\ 2x - 6, & 3 \le x < 4 \\ -2x + 10, & 4 \le x \le 5 \end{cases}$$
(3.64)

A Figura 3.3 é um esboço da função f(x) obtida. Ela foi gerada no Scilab usando os comandos:

//pontos fornecidos xi = [0;1;2;3;4;5] yi = [0;4;3;0;2;0]

```
//numero de pontos
n = 6
//funcao interpoladora
function [y] = f(x)
  for i=1:n-2
    if ((x>=xi(i)) & (x<xi(i+1))) then
      y = yi(i)*(x-xi(i+1))/(xi(i) - xi(i+1)) ...
          + yi(i+1)*(x-xi(i))/(xi(i+1) - xi(i));
    end
  end
  if ((x>=xi(n-1)) & (x<=xi(n))) then
    y = yi(n-1)*(x-xi(n))/(xi(n-1) - xi(n)) ...
        + yi(n)*(x-xi(n-1))/(xi(n) - xi(n-1));
  end
endfunction
//graficando
xx = linspace(xi(1),xi(n),500)';
clear yy
for i=1:max(size(xx))
  yy(i) = f(xx(i))
plot(xi,yi,'r.',xx,yy,'b-')
```

3.6 Interpolação cúbica segmentada - spline

A ideia empregada na interpolação linear segmentada pode ser estendida através da utilização de polinômios de grau superior. A escolha de polinômios de grau superior implica uma maior liberdade (há um número maior de coeficientes) na construção da interpolação. Parte dessa liberdade pode ser utilizada na exigência de suavidade para a interpolação.

Definição 3.6.1 (spline de ordem m). Dado um conjunto de n pontos $\mathcal{I} = \{(x_j, y_j)\}_{j=1}^n$ tais que $x_{j+1} > x_j$, ou seja, as abscissas são distintas e estão em ordem crescente; um spline de ordem m que interpola estes pontos é uma função s com as seguintes propriedades:

- i) Em cada intervalo $[x_j,x_{j+1})$, $j=1,2,\ldots n-2$ e no segmento $[x_{n-1},x_n]$ s é um polinômio de grau menor ou igual a m;
- ii) Em algum dos intervalos s é um polinômio de grau m;

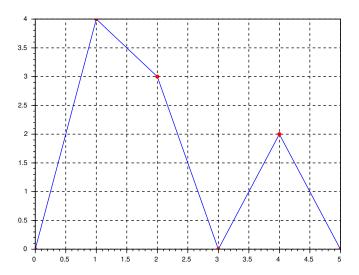


Figure 3.3: Interpolação linear segmentada.

- iii) Em cada $x_j \in \mathcal{I}$, $s(x_j) = y_j$, isto é, o spline interpola os pontos dados;
- iv) s é uma função de classe C^{m-1} , isto é, é função m-1 vezes continuamente diferenciável.

São n-1 intervalos e em cada um deles há m+1 coeficientes a se determinar. As condições iii e iv impostas pela definição correspondem respectivamente a n e m(n-2) equações. Estas últimas, se devem à exigência de continuidade nos pontos internos, ou seja, os pontos de \mathcal{I} com índices $j=2,3,\ldots,n-1$. Portanto, há m-1 coeficientes a mais do que o número de equações e, à exceção do caso m=1 (interpolação linear segmentada), o problema é subdeterminado. Ou seja, uma vez fixada a ordem m>1, existem infinitos splines de ordem m que interpolam os pontos do conjunto \mathcal{I} .

O caso m=3, denominado spline cúbico, é de grande interesse pois reproduz o comportamento físico de réguas delgadas com estrutura elástica homogênea e perfil uniforme sujeitas aos vínculos representados pelos pontos do conjunto \mathcal{I} . A equação diferencial que rege o comportamento do perfil dessas réguas é um caso particular do equação da viga de Euler-Bernoulli. Neste caso, a equação tem a forma

$$\frac{d^4y}{dx^4} = 0, (3.65)$$

cuja solução geral é um polinômio de grau 3.

Vamos supor que um spline cúbico que interpola o conjunto de pontos \mathcal{I} é conhecido. Como esse spline é uma função de classe \mathcal{C}^2 , as suas derivadas nos pontos do conjunto \mathcal{I} são conhecidas também. Seja y'_j , o valor dessa derivada em $x = x_j$. Agora, vamos considerar dois pares de pontos sucessivos de \mathcal{I} , (x_j,y_j) e (x_{j+1},y_{j+1}) . A forma do spline cúbico no intervalo $[x_j,x_{j+1})$ pode ser identificada com a solução da equação diferencial (3.65) no intervalo (x_j,x_{j+1}) sujeita às condições de contorno

$$y(x_j) = y_j, \quad y'(x_j) = y'_j, \quad y(x_{j+1}) = y_{j+1} \quad \text{e} \quad y'(x_{j+1}) = y'_{j+1}.$$
 (3.66)

A solução desse problema de contorno é escrita de modo conveniente como

$$s_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3,$$
(3.67)

onde as constantes a_j , b_j , c_j e d_j se relacionam às do problema de contorno. As duas primeiras seguem imediatamente das condições de contorno em x_j :

$$a_j = y_j \quad e \quad b_j = y'_j.$$
 (3.68)

As duas últimas são obtidas pela solução do sistema de equações formado pelas condições de contorno em x_{i+1} :

$$c_{j} = 3 \frac{y_{j+1} - y_{j}}{(x_{j+1} - x_{j})^{2}} - \frac{y'_{j+1} + 2y'_{j}}{x_{j+1} - x_{j}} \quad e \quad d_{j} = -2 \frac{y_{j+1} - y_{j}}{(x_{j+1} - x_{j})^{3}} + \frac{y'_{j+1} + y'_{j}}{(x_{j+1} - x_{j})^{2}}$$
(3.69)

Esta relação entre o conjunto de valores para a derivada de um spline cúbico $\{y'_j\}_{j=1}^n$ nos pontos de interpolação \mathcal{I} e os coeficientes dos polinômios em cada intervalo de interpolação pode ser resumida na seguinte proposição:

Proposição 3.6.1. Seja s um spline cúbico que interpola o conjunto de pontos $\mathcal{I} = \{(x_j, y_j)\}_{j=1}^n \subset \mathbb{R}^2$ tais que $x_{j+1} > x_j$. Se $\{y_j'\}_{j=1}^n$ é o conjunto dos valores da derivada de s em x_j , então em cada intervalo $[x_j, x_{j+1})$ (fechado também à direita quando j = n - 1) o spline é igual a s_j :

$$s_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3, \tag{3.70}$$

onde

$$a_{j} = y_{j}, \quad c_{j} = 3 \frac{y_{j+1} - y_{j}}{h_{j}^{2}} - \frac{y'_{j+1} + 2y'_{j}}{h_{j}},$$

$$b_{j} = y'_{j}, \quad d_{j} = -2 \frac{y_{j+1} - y_{j}}{h_{j}^{3}} + \frac{y'_{j+1} + y'_{j}}{h_{j}^{2}}$$

$$(3.71)$$

e

$$h_j = x_{j+1} - x_j, \quad j = 1, 2, \dots, n-1$$
 (3.72)

é a distância entre as abscissas de dois pontos de interpolação consecutivos.

De acordo com a proposição anterior, toda informação sobre um spline cúbico é armazenada no conjunto $\{(x_j,y_j,y_j')\}_{j=1}^n$. Por construção, uma função s definida a partir de (3.70), (3.71) e (3.72) com um conjunto $\{(x_j,y_j,y_j')\}_{j=1}^n \subset \mathbb{R}^3$, onde $x_{j+1} > x_j$ é de classe \mathcal{C}^1 mas não necessariamente um spline cúbico. Para ser um spline cúbico, os valores do conjunto $\{y_j'\}_{j=1}^n$ devem garantir a continuidade da derivada segunda de s em todo intervalo (x_1,x_n) . Ou seja, devemos ter

$$\lim_{x \nearrow x_{j+1}} s_j''(x) = s_{j+1}''(x_{j+1}) \tag{3.73}$$

em todos os pontos internos $j=1,2,\ldots,n-2$. Em termos dos coeficientes dos polinômios cúbicos (3.70), a equação anterior assume a forma

$$2c_j + 6d_jh_j = 2c_{j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, n-2.$$
 (3.74)

Esta última equação e (3.71) permitem construir um sistema de equações lineares para as variáveis y'_i :

Proposição 3.6.2. Dado o conjunto de pontos $\mathcal{I} = \{(x_j, y_j)\}_{j=1}^n \subset \mathbb{R}^2$ tais que $x_{j+1} > x_j$, as derivadas de um spline cúbico que interpola os pontos \mathcal{I} , y'_j , $j = 1, 2, \ldots, n$ satisfazem o sistema de equações algébricas lineares

$$h_j y'_{j-1} + 2(h_{j-1} + h_j) y'_j + h_{j-1} y'_{j+1} = 3 \left(h_j \frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}} + h_{j-1} \frac{y_{j+1} - y_j}{h_j} \right), \quad (3.75)$$

onde
$$j = 2,3,...,n-1$$
 e $h_i = x_{i+1} - x_i$.

O sistema de equações (3.75) é subdeterminado. São n variáveis e n-2 equações. A inclusão de duas equações adicionais linearmente independentes das n-2 equações (3.75) possibilita a existência de uma única solução. Tipicamente essas equações adicionais envolvem o comportamento do spline na fronteira ou na sua vizinhança. A seguir, veremos quatro escolhas mais conhecidas.

3.6.1 Spline natural

Uma forma de definir as duas equações adicionais para completar o sistema (3.75) é impor condições de fronteira livres (ou naturais), ou seja,

$$s''(x_1) = s''(x_n) = 0. (3.76)$$

De acordo com (3.70) essas equações implicam respectivamente

$$c_1 = 0$$
 e $2c_{n-1} + 6d_{n-1}h_{n-1} = 0,$ (3.77)

ou seja,

$$\begin{cases}
2y'_1 + y'_2 = 3\frac{y_2 - y_1}{h_1} \\
y'_{n-1} + 2y'_n = 3\frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}}
\end{cases}$$
(3.78)

Essas duas equações em conjunto com as equações (3.75) formam um sistema de n equações algébricas lineares Ay' = z, onde

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ h_2 & 2(h_1 + h_2) & h_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & h_3 & 2(h_2 + h_3) & h_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-1} & 2(h_{n-1} + h_{n-2}) & h_{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix},$$
(3.79)

$$y' = \begin{bmatrix} y'_1 \\ y'_2 \\ \vdots \\ y'_n \end{bmatrix} \qquad e \qquad z = 3 \begin{bmatrix} \frac{y_2 - y_1}{h_1} \\ h_2 \frac{y_2 - y_1}{h_1} + h_1 \frac{y_3 - y_2}{h_2} \\ h_3 \frac{y_3 - y_2}{h_2} + h_2 \frac{y_4 - y_3}{h_3} \\ \vdots \\ h_{n-1} \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-2}} + h_{n-2} \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} \\ \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} \end{bmatrix} . \tag{3.80}$$

Observe que a matriz A é diagonal dominante estrita e, portanto, o sistema Ay' = z possui solução única. Calculado y', os valores dos a_j , b_j , c_j e d_j são obtidos diretamente pelas expressões (3.71).

Exemplo 3.6.1. Construa um spline cúbico natural que passe pelos pontos (2, 4,5), (5, -1,9), (9, 0,5) e (12, -0,5).

Solução. O spline desejado é uma função definida por partes da forma:

$$s(x) = \begin{cases} a_1 + b_1(x-2) + c_1(x-2)^2 + d_1(x-2)^3, & 2 \le x < 5 \\ a_2 + b_2(x-5) + c_2(x-5)^2 + d_2(x-5)^3, & 5 \le x < 9 \\ a_3 + b_3(x-9) + c_3(x-9)^2 + d_3(x-9)^3, & 9 \le x \le 12 \end{cases}$$
 (3.81)

As variáveis y'_1, y'_2, y'_3 e y'_4 resolvem o sistema Ay' = z, onde

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 2(4+3) & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 2(3+4) & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 14 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 14 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}, \tag{3.82}$$

$$y = \begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \\ y_3' \\ y_4' \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad z = 3 \begin{bmatrix} \frac{1}{3}(-1,9-4,5) \\ \frac{4}{3}(-1,9-4,5) + \frac{3}{4}(0,5-(-1,9)) \\ \frac{3}{4}(0,5-(-1,9)) + \frac{4}{3}(-0.5-(0,5)) \\ \frac{1}{3}(-0,5-(0.5)) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -6,4 \\ -20,2 \\ 1,4 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (3.83)$$

A solução é $y'_1 = -2.8\bar{3}$, $y'_2 = -0.7\bar{3}$, $y'_3 = 0.4\bar{6}$ e $y'_4 = -0.7\bar{3}$. Calculamos os coeficientes usando as expressões (3.71):

$$a_1 = y_1 = 4.5,$$
 $b_1 = y'_1 = -2.8\overline{3},$
 $a_2 = y_2 = -1.9,$ $b_2 = y'_2 = -0.7\overline{3},$
 $a_3 = y_3 = 0.5.$ $b_3 = y'_3 = 0.4\overline{6},$
 $c_1 = 0,$ $d_1 = 0.0\overline{7},$
 $c_2 = 0.7,$ $d_2 = -0.091\overline{6},$
 $c_3 = -0.4,$ $d_3 = 0.0\overline{4}.$ (3.84)

Portanto:

$$S(x) = \begin{cases} 4.5 - 2.8\bar{3}(x-2) + 0.0\bar{7}(x-2)^3 & , 2 \le x < 5 \\ -1.9 - 0.7\bar{3}(x-5) + 0.7(x-5)^2 - 0.091\bar{6}(x-5)^3 & , 5 \le x < 9 \\ 0.5 + 0.4\bar{6}(x-9) - 0.4(x-9)^2 + 0.0\bar{4}(x-9)^3 & , 9 \le x \le 12 \end{cases}$$
 (3.85)

No Scilab, podemos utilizar:

xi = [2;5;9;12] yi = [4.5;-1.9;0.5;-0.5] hi = xi(2:4)-xi(1:3)A = [2 1 0 0;hi(2) 2*(hi(1)+hi(2)) hi(1) 0; ...

```
0 hi(3) 2*(hi(2)+hi(3)) hi(2);0 0 1 2 ]
z = 3*[(yi(2)-yi(1))/hi(1); ...
   hi(2)/hi(1)*(yi(2)-yi(1))+hi(1)/hi(2)*(yi(3)-yi(2));...
   hi(3)/hi(2)*(yi(3)-yi(2))+hi(2)/hi(3)*(yi(4)-yi(3));...
   (yi(4)-yi(3))/hi(3)]
dyi = A \z
a=yi(1:3)
b = dyi(1:3)
c(1)=0
c(2:3)=3*(yi(3:4)-yi(2:3))./hi(2:3).^2...
         - (dyi(3:4)+2*dyi(2:3))./hi(2:3)
d=-2*(yi(2:4)-yi(1:3))./hi.^3 + (dyi(2:4)+dyi(1:3))./hi.^2
for i=1:3
    P(i) = poly([a(i) b(i) c(i) d(i)], 'x', 'coeff')
    z = [xi(i):.01:xi(i+1)]
    plot(z,horner(P(i),z-xi(i)))
end
```

O mesmo resultado é obtido através das instruções splin e interp do Scilab:

```
xi = [2;5;9;12]
vi = [4.5; -1.9; 0.5; -0.5]
dyi=splin(xi,yi,'natural')
z=linspace(xi(1),xi($))
plot(z,interp(z,xi,yi,dyi))
```

 \Diamond

3.6.2 Spline fixado

O spline fixado s é obtido pela escolha dos valores das derivadas nas extremidades do intervalo de interpolação. Isto diminui o número de variáveis para n-2 pois y'_1 e y'_n deixam de ser incógnitas.

As equações (3.75) formam um sistema de n-2 equações Ay'=z, onde

As equações (3.75) formam um sistema de
$$n-2$$
 equações $Ay=z$, onde
$$A = \begin{bmatrix} 2(h_1+h_2) & h_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ h_3 & 2(h_2+h_3) & h_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & h_4 & 2(h_3+h_4) & h_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-2} & 2(h_{n-3}+h_{n-2}) & h_{n-3} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{n-1} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) \end{bmatrix},$$
(3.86)

Prof. M.e Daniel Cassimiro

$$y' = \begin{bmatrix} y_2' \\ y_3' \\ \vdots \\ y_{n-1}' \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad z = 3 \begin{bmatrix} h_2 \frac{y_2 - y_1}{h_1} + h_1 \frac{y_3 - y_2}{h_2} - h_2 y_1' \\ h_3 \frac{y_3 - y_2}{h_2} + h_2 \frac{y_4 - y_3}{h_3} \\ \vdots \\ h_{n-2} \frac{y_{n-2} - y_{n-3}}{h_{n-3}} + h_{n-3} \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-2}} \\ h_{n-1} \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-2}} + h_{n-2} \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} - h_{n-2} y_n' \end{bmatrix} . \quad (3.87)$$

Observe que a matriz A é diagonal dominante estrita e, portanto, o sistema Ay'=z possui solução única.

3.6.3 Spline not-a-knot

O spline not-a-knot é definido com um spline cúbico que satisfaz as equações adicionais

$$\lim_{x \nearrow x_2} s_1'''(x) = s_2'''(x_2) \quad e \quad \lim_{x \nearrow x_{n-1}} s_{n-2}''(x) = s_{n-1}''(x_{n-1}). \tag{3.88}$$

Em termos dos coeficientes (3.70), as equações anteriores correspondem a

$$d_1 = d_2 \quad \text{e} \quad d_{n-2} = d_{n-1},$$
 (3.89)

ou seja,

$$\begin{cases} h_2^2 y_1' + (h_2^2 - h_1^2) y_2' - h_1^2 y_3' = 2\left(h_2^2 \frac{y_2 - y_1}{h_1} - h_1^2 \frac{y_3 - y_2}{h_2}\right) \\ h_{n-1}^2 y_{n-2}' + (h_{n-1}^2 - h_{n-2}^2) y_{n-1}' - h_{n-2}^2 y_n' = 2\left(h_{n-1}^2 \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-2}} - h_{n-2}^2 \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}}\right) \end{cases}$$

$$(3.90)$$

Essas duas equações agregadas às equações (3.75) formam um sistema de n equações Ay'=z, onde

$$A = \begin{bmatrix} h_2^2 & h_2^2 - h_1^2 & -h_1^2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ h_2 & 2(h_1 + h_2) & h_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & h_3 & 2(h_2 + h_3) & h_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-1} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) & h_{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-1} & h_{n-1}^2 - h_{n-2}^2 & -h_{n-2}^2 \end{bmatrix},$$
(3.91)

Prof. M.e Daniel Cassimiro

$$y' = \begin{bmatrix} y'_1 \\ y'_2 \\ \vdots \\ y'_n \end{bmatrix} \qquad e \qquad z = \begin{bmatrix} 2\left(h_2^2 \frac{y_2 - y_1}{h_1} - h_1^2 \frac{y_3 - y_2}{h_2}\right) \\ 3\left(h_2 \frac{y_2 - y_1}{h_1} + h_1 \frac{y_3 - y_2}{h_2}\right) \\ \vdots \\ 3\left(h_{n-1} \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-2}} + h_{n-2} \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}}\right) \\ 2\left(h_{n-1}^2 \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-2}} - h_{n-2}^2 \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}}\right) \end{bmatrix}. \quad (3.92)$$

Se reduzirmos esse sistema pela eliminação das incógnitas y'_1 e y'_n , o sistema resultante possui uma matriz de coeficientes diagonal dominante estrita, portanto, a solução é única.

O termo not-a-knot (não nó) relaciona-se à nomenclatura dos splines. O termo nó é utilizado para os pontos interpolados. Neles, a derivada terceira da função spline é descontínua, portanto, quando impomos a continuidade dessa derivada em x_2 e x_{n-1} é como se esses pontos deixassem de ser nós.

3.6.4 Spline periódico

Se o conjunto de n pontos da interpolação \mathcal{I} for tal que $y_1 = y_n$, então é possível construir o spline periódico, definido com um spline cúbico que satisfaz as seguintes condições de periodicidade

$$s'_1(x_1) = s'_{n-1}(x_n) \quad \text{e} \quad s''_1(x_1) = s''_{n-1}(x_n).$$
 (3.93)

Em termos dos coeficientes (3.70)

$$b_1 = b_{n-1}$$
 e $2c_1 = 2c_{n-1} + 6d_{n-1}h_{n-1}$, (3.94)

ou seja,

$$\begin{cases} y_1' - y_n' = 0 \\ 2h_{n-1}y_1' + h_{n-1}y_2' + h_1y_{n-1}' + 2h_1y_n' = 3\left(h_{n-1}\frac{y_2 - y_1}{h_1} + h_1\frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}}\right) \end{cases}$$
(3.95)

Essas duas equações agregadas às equações (3.75) formam um sistema de n equações Ay'=z, onde

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ h_2 & 2(h_1 + h_2) & h_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & h_3 & 2(h_2 + h_3) & h_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-1} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) & h_{n-2} \\ 2h_{n-1} & h_{n-1} & 0 & \cdots & 0 & h_1 & 2h_1 \end{bmatrix},$$
(3.96)

Prof. M.e Daniel Cassimiro

$$y' = \begin{bmatrix} y'_1 \\ y'_2 \\ \vdots \\ y'_n \end{bmatrix} \quad e \quad z = 3 \begin{bmatrix} 0 \\ h_2 \frac{y_2 - y_1}{h_1} + h_1 \frac{y_3 - y_2}{h_2} \\ \vdots \\ h_{n-1} \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-2}} + h_{n-2} \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} \\ h_{n-1} \frac{y_2 - y_1}{h_1} + h_1 \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} \end{bmatrix}. \quad (3.97)$$

Neste caso também, se reduzirmos esse sistema pela eliminação das incógnitas y'_1 e y'_n , o sistema resultante possui uma matriz de coeficientes diagonal dominante estrita, portanto, a solução é única.

Appendix A

Rápida introdução à linguagem Julia

Neste apêndice, abordaremos a linguagem computacional Julia que nos auxiliará no processo de obtenção de resultados de operações e computações utilizando o computador.

A.1 Sobre a linguagem Julia

A linguagem de programação Julia é uma linguagem moderna e poderosa que foi criada para atender aos requisitos da computação numérica de alto desempenho e científica. Seus criadores quiseram reunir na linguagem as principais (melhores) características de outras linguagens:

- Ruby;
- matlab;
- R;
- Julia;
- C.

Julia é uma linguagem de programação de alto nível, interpretada e multiparadigma.

Para mais informações, consulte:

- Página oficial da linguagem Julia: https://julialang.org/
- Manual Julia: https://docs.julialang.org/en/v1/manual/getting-started/

• GitHub do Professor Daniel: https://github.com/Daniel-C-Fernandes/ Numerico/blob/main/Mini-curso-Julia.ipynb

- Julia for Data science: https://juliadatascience.io/pt/
- Julia Academy: https://juliaacademy.com/
- GitHub Julia: https://github.com/JuliaLang/julia
- Introdução: https://julia.vento.eng.br/
- Curso Julia USP: https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/7879038/mod_resource/content/4/Tutorial%20para%20a%20Linguagem%20Julia.pdf
- Tutoriais Julia: https://julialang.org/learning/tutorials/

Para saber mais: https://www.youtube.com/watch?v=Xzdg9cz0xD8&t=29s

A.1.1 Características Principais

- **Tipagem Dinâmica:** Suas variáveis podem receber qualquer tipo de dado, e sua sintaxe se aproxima mais da linguagem humana do que da linguagem de máquina.
- Multiparadigma: Suporta diversos paradigmas de programação, como orientação a objetos e programação funcional.
- Alto Nível: Possui uma sintaxe expressiva e amigável.
- Gratuita e Open Source: Julia é distribuída sob a licença MIT.
- Suporte a Unicode e UTF-8: Permite o uso de símbolos matemáticos durante a escrita de programas. Gerenciador de Pacotes Prático: Facilita a instalação e atualização de pacotes.

Aplicações:

- Data Science: Julia é usada para análise de dados e descoberta de conhecimento a partir de grandes conjuntos de dados. Machine Learning: Possui pacotes poderosos para criação de modelos de aprendizado de máquina.
- Computação Científica: Ideal para construir modelos matemáticos e soluções numéricas.

• Desenvolvimento Geral: Pode ser aplicada no desenvolvimento de aplicações web, desktop e outras áreas. Em resumo, Julia é uma linguagem versátil que combina alta performance com uma sintaxe amigável, tornando-a uma escolha popular entre cientistas de dados, desenvolvedores e entusiastas da programação.

Visão geral sobre linguagens de programação: Qual a melhor linguagem de programação? Veja https://www.youtube.com/watch?v=DjUB-yVWT2A.

Para iniciantes, recomendamos o curso EAD gratuito no site Goggo dot jl:

https://www.youtube.com/watch?v=0oChN11wf_4

A.1.2 Instalação e execução

Para versões Linux Ubuntu ou Debian, basta utilizar o comando a seguir e esperar a instalação:

```
> sudo apt install julia -y
```

Para versões Windows, utilize o Prompt de comando PowerShell para inserir o comando de instalação a seguir:

```
> winget install julia -s msstore
```

Execute o modo interativo da linguagem Julia simplesmente digitando o nome da linguagem seguida de Enter:

```
julia
```

Dessa forma, abre-se o interpretador interativo da linguagem Julia. Pode-se então, como primeira interação, realizar uma operação matemática:

```
julia> 2 + 3
5
```

No site oficial da linguagem Julia estão disponíveis para download os interpretadores para os principais sistemas operacionais, Linux, Mac OS e Windows.

Além disso, no GitHub do professor Daniel, há um tutorial de instalação para a versão Windows do intepretador de linguagem Julia juntamente com o ambiente Jupyter Notebook e uma introdução à linguagem de programação com exemplos.

A.1.3 Usando Julia

O uso da linguagem Julia pode ser feito de três formas básicas:

• usando um **console Julia** de modo interativo;

- executando um código codigo.jl no console Julia;
- executando um código Julia codigo. jl diretamente no terminal;

Execução no terminal de um código salvo em .jl

Para se executar um código diretamente no terminal de comando do sistema operacional, basta escrevermos o código que desejamos em um arquivo texto de extensão .jl.

Dessa forma, por exemplo, salvaremos o seguinte código num arquivo chamado ola.jl:

```
println("Hello world!!")
```

Após o salvamento, estando o prompt de comando no mesmo diretório do arquivo salvo, basta executarmos o seguinte comando, obtendo-se a resposta que se segue:

```
pulia ola.jl
Hello world!!
```

Utilização do Console interativo Julia

Para executarmos qualquer comando no console interativo da linguagem Julia, iniciaremos o console interativo da seguinte forma:

```
ı > julia
```

Estando o modo interativo rodando no prompt de comando, basta inserirmos o comando desejado e verificar o resultado da saída do comando registrado na linha seguinte do prompt:

```
julia> println("Hello world!!")
Hello world!!
```

Execução no console de um código salvo em .jl

Para executarmos qualquer um código salvo com extensão .jl no console interativo da linguagem Julia, iniciaremos o console interativo da seguinte forma:

```
ı > julia
```

Estando o modo interativo rodando no prompt de comando, basta inserirmos o seguinte comando e verificar o resultado da saída do arquivo registrado na linha seguinte do prompt (observe que o arquivo deve estar localizado em ...):

```
julia> include ola.jl
Hello world!!
```

A.2 Elementos da linguagem

Julia é uma linguagem de alto nível de tipagem dinâmica, ou seja, uma variável é criada quando um valor é atribuído a ela, não sendo necessário especificar explicitamente cada tipo de variável, Julia vai inferir o tipo de cada variável por você. Porém, também é possível especificar a declaração da variável a ser criada, se for desejável.

A.2.1 Variáveis

Variáveis são valores armazenados pelo computador atrelados a um nome específico, para seja possível recuperar ou alterar seu valor posteriormente.

Alguns tipos de variáveis em Julia:

• Números inteiros: Int64

• Números reais: Float64

• Matrizes inteiras: Matrix{Int64}

• Matrizes reais: Matrix{Float64}

• Booleanas: Bool

• Strings: String

Por padrão, números são armazenados usando 64 bits, sendo possível aumentar ou reduzir a precisão, utilizando os tipos Int8 ou Int128, por exemplo.

Criamos novas variáveis escrevendo o nome da variável à esquerda e seu valor à direita, e no meio usamos o operador de atribuição =.

Vejamos alguns exemplos:

```
julia> x = 1
1
1
julia> y = x * 2.0
2.0
```

Prof. M.e Daniel Cassimiro

variaveis com emogi

a variável x recebe o valor int 1 e, logo após, na segunda linha de comando, a variável y recebe o valor double 2. Observamos que o símbolo = significa o operador de atribuição não o de igualdade. O operador lógico de igualdade no Julia é ==. Veja os seguintes comandos:

```
julia> print(x, "-", y)
1-2.0

julia> typeof(x), typeof(y)
(Int64, Float64)
```

Comentários e continuação de linha de comando são usados como no seguinte exemplo:

```
julia> # Isto é um comentário

julia> x = 1
1

julia> print(x)
1
```

Utilizando Julia como calculadora....

A.3 Repositórios

Tartaruga

OhMyREPL: add OhMyREPL using OhMyREPL

Criar arquivo: .julia/config/startup.jl using OhMyREPL

A.4 Estruturas de ramificação e repetição

A linguagem Julia contém estruturas de repetição e ramificação padrões de linguagens estruturadas.

A.4.1 A instrução de ramificação "if"

A instrução "if" permite executar um pedaço do código somente se uma dada condição for satisfeita.

Exemplo A.4.1. Veja o seguinte código Julia:

```
#!/usr/bin/env Julia
# -*- coding: utf-8 -*-

i = 2
if (i == 1):
    print("Olá!")

elif (i == 2):
    print("Hallo!")

elif (i == 3):
    print("Hello!")

else:
    print("Ga Va!")
```

Qual é a saída apresentada pelo código? Por quê?

Observamos que, em Julia, a identação é obrigatória, pois é ela que defini o escopo da instrução.

A.4.2 A instrução de repetição "for"

A instrução for permite que um pedaço de código seja executado repetidamente.

Exemplo A.4.2. Veja o seguinte código:

```
for i in range(6):
    print(i)
```

Qual é a saída deste código? Por quê?

Exemplo A.4.3. Veja o seguinte código:

```
import numpy as np
for i in np.arange(1,8,2):
    print(i)
```

Qual é a saída deste código? Por quê?

Exemplo A.4.4. Veja o seguinte código:

```
for i in np.arange(10,0,-3):
    print(i)
```

O que é mostrado no console do Julia?

Exemplo A.4.5. Veja o seguinte código:

```
import numpy as np
for i in np.arange(10,1,-3):
    print(i)
```

O que é mostrado no console do Julia?

A.4.3 A instrução de repetição "while"

A instrução while permite que um pedaço de código seja executado repetidamente até que uma dada condição seja satisfeita.

Exemplo A.4.6. Veja o seguinte código Julia:

```
s = 0
i = 1
while (i <= 10):
    s = s + i
    i = i + 1</pre>
```

Qual é o valor de s ao final da execução? Por quê?

A.5 Funções

Além das muitas funções disponíveis em Julia (e os tantos muitos pacotes livres disponíveis), podemos definir nossas próprias funções. Para tanto, existe a instrução def. Veja os seguintes exemplos:

Exemplo A.5.1. O seguinte código:

```
def f(x):
    return x + np.sin(x)
```

define a função f(x) = x + sen x.

Observe que $f(\pi) = \pi$. Confirme isso computando:

```
1 >>> f(np.pi)
```

Exemplo A.5.2. O seguinte código em Julia:

```
def h(x,y):
    if (x < y):
        return y - x
    else:
        return x - y</pre>
```

define a função:

$$h(x,y) = \begin{cases} y - x & , x < y \\ x - y & , x \ge y \end{cases}$$
 (A.1)

Exemplo A.5.3. O seguinte código:

```
def J(x):
    y = np.zeros((2,2))
    y[0,0] = 2*x[0]
    y[0,1] = 2*x[1]

y[1,0] = -x[1]*np.sin(x[0]*x[1])
    y[1,1] = -x[0]*np.sin(x[0]*x[1])

return y
```

define a matriz jacobiana $J(x_1,x_2):=\frac{(f_1,f_2)}{(x_1,x_2)}$ da função:

$$\mathbf{f}(x_1, x_2) = (x_1^2 + x_2^2, \cos(x_1 x_2)). \tag{A.2}$$

A.5.1 Operações matemáticas elementares

Em Julia, os operadores matemáticos elementares são os seguintes:

```
+ # adição
- # subtração

* # multiplicação

/ # divisão de a por b

/ # divisão de b por a

/ # Resto da divisão euclidiana

# Quociente inteiro da divisão euclidiana (alt + 246)

(ou \div + tab)

# potenciação
// # Frações

exp() #potenciação de base e

Log() #Logarítimo Neperiano

Log10() #Logarítimo de base 10
```

A.5.2 Funções e constantes elementares

Várias funções e constantes elementares estão disponíveis no pacote módulo Julia math. Por exemplo:

```
julia> π = pi (\pi + tab)
π = 3.1415926535897...

julia> cos(π)
-1.0

julia> exp(1)
2.718281828459045

julia> log(exp(1))
11
1.0
```

Observamos que \log é a função logaritmo natural, isto é, $f(x) = \ln(x)$, enquanto que a implementação Julia de $f(x) = \log(x)$ é:

```
julia> log10(10)
1.0
```

Veja mais na documentação Julia.

A.5.3 Operadores lógicos

Em Julia, o valor lógico verdadeiro é escrito como True e o valor lógico falso como False. Temos os seguintes operadores lógicos disponíveis:

Veja mais em https://acervolima.com/operadores-em-julia/.

A.6 Matrizes

Em Julia, temos um ótimo suporte para computação científica com o pacote numpy. Uma matriz $A = [a_{i,j}]_{i,j=1}^{m,n}$ em Julia é definida usando-se a seguinte sintaxe:

```
ı julia> A = [
```

A.6. MATRIZES 83

Exemplo A.6.1. Defina a matriz:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} \tag{A.3}$$

Solução. Em Julia, digitamos:

A seguinte lista contém uma série de funções que geram matrizes particulares:

```
eye # matriz identidade
linspace # vetor de elementos linearmente espaçados
ones # matriz cheia de uns
zeros # matriz nula
```

A.6.1 Obtendo dados de uma matriz

A função numpy. shape retorna o tamanho de uma matriz, por exemplo:

Prof. M.e Daniel Cassimiro

informando que a matriz A tem três linhas e duas colunas.

Existem vários métodos para acessar os elementos de uma matriz dada A:

• a matriz inteira acessa-se com a sintaxe:

```
1 A
```

• o elemento da i-ésima linha e j-ésima coluna acessa-se usando a sintaxe:

```
1 A[i,j]
```

• o bloco formado pelas linhas i_1 , i_2 e pelas colunas j_1 , j_2 obtém-se usando a sintaxe:

```
A[i1:i2, j1:j2]
```

Exemplo A.6.2. Veja as seguintes linhas de comando:

Definida uma matriz A em Julia, as seguintes sintaxes são bastante úteis:

```
A[:,:] toda a matriz

A[i:j,k] os elementos das linhas i até j (exclusive) da k-ésima coluna

A[i,j:k] os elementos da i-ésima linha das colunas j até k (exclusive)

A[i,:] a i-ésima linha da matriz

A[:,j] a j-ésima coluna da matriz
```

Atenção, os índices em Julia iniciam-se em 0. Assim, o comando A[1:3,1:4] retorna o bloco da matriz A compreendido da segunda à terceira linha e da segunda a quarta coluna desta matriz.

Exemplo A.6.3. Veja as seguintes linhas de comando:

A.6. MATRIZES 85

A.6.2 Operações matriciais e elemento-a-elemento

Em Julia com numpy, o operador * opera elemento a elemento. Por exemplo:

A multiplicação matricial obtemos com:

```
>>> C = A.dot(B)
>>> print(C)
[[6 3]
[6 3]]
```

Aqui, temos as sintaxes análogas entre operações elemento-a-elemento:

```
+ # adição
- # subtração
* # multiplicação
/ # divisão
- # potenciação
```

Prof. M.e Daniel Cassimiro

Exemplo A.6.4. Veja as seguintes linhas de comando:

```
| >>> A = np.ones((2,2))
2 >>> A
 array([[ 1., 1.],
        [ 1., 1.]])
 >>> B = 2 * np.ones((2,2))
6 >>> B
 array([[ 2., 2.],
        [2., 2.]])
 >>> A*B
 array([[ 2., 2.],
        [2., 2.]])
12 >>> A.dot(B)
13 array([[ 4., 4.],
        [4., 4.]
 >>> A/B
16 array([[ 0.5, 0.5],
        [ 0.5, 0.5]])
```

A.7 Gráficos

Para criar um esboço do gráfico de uma função de uma variável real y = f(x), podemos usar a biblioteca Julia mathplotlib. A função matplotlib. pyplot. plot faz uma representação gráfica de um conjunto de pontos $\{(x_i, y_i)\}$ fornecidos. Existe uma série de opções para esta função de forma que o usuário pode ajustar várias questões de visualização. Veja a documentação.

Exemplo A.7.1. Veja as seguintes linhas de código:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def f(x): return x**3 + 1

...

>>> x = np.linspace(-2,2)

>>> plt.plot(x, f(x))

[<matplotlib.lines.Line2D object at 0x7f4f6d153510>]

>>> plt.grid()

>>> plt.show()
```

Resposta dos Exercícios

Recomendamos ao leitor o uso criterioso das respostas aqui apresentadas. Devido a ainda muito constante atualização do livro, as respostas podem conter imprecisões e erros.

```
E 2.1.1. a) 4; b) 9; c) b^2; d) 7; e) 170; f) 7,125; g) 3,28
      E 2.1.2. a) 21,172; b) 5,5; c) 303,25; d) 4,\bar{6}.
      E 2.1.3. (101,1)_2.
      E 2.1.4. (11,1C)_{16}.
      E 2.1.5. a) (12,\bar{31})_5; b) (45,1)_6.
      E 2.1.6. 10,5; (1010,1)_2.
      E 2.1.7. a) (100101,001)_2; b) (11,4)_{16}; c) (11,5)_8; d) (9,A)_{16}.
      E 2.1.8. 50; 18.
      E 2.2.1.
                                                 a) 2,99792458 \times 10^5 b) 6,62607 \times 10^{-34}
                                                                                                                                             (2.32)
                                                 c) 6,674 \times 10^{-8} d) 9,80665 \times 10^4
      {\bf E} 2.2.2. No GNU Octave, temos:
>> printf("%1.7e\n", 299792.458)
2.9979458e+04
>> printf("%1.5e\n", 66.2607)
6.62607e+01
>> printf("%1.3e\n", 0.6674)
6.674e-01
>> printf("%1.5e\n", 9806.65e1)
9.80665e+04
      E 2.3.1. (a) 1,1; (b) 7,3; (c) -5,9.
      E 2.3.2. (a) 1,2; (b) 1,2; (c) 2,4; (d) -2,4.
      E 2.3.3.
```

Este exercício está sem resposta sugerida. Proponha uma resposta. Veja como em: https://github.com/livroscolaborativos/CalculoNumerico

 $\textbf{E 2.4.1.} \ \ \text{a)} \ \ 2^6 + 2^5 + 2^1 = 98; \ \text{b)} \ \ 2^4 + 2^3 + 2^2 + 2^0 = 29; \ \text{c)} \ \ -2^7; \ \text{d)} \ \ -2^7 + 2^6 + 2^5 + 2^1 + 2^0 = -29; \ \text{e)} -2^7 + 2^6 + 2^5 + 2^4 + 2^$

E 2.4.2. a) 25186; b) 7453; c) -7453; d) -1.

E 2.4.3. a) 70; b) -72; c) 72.

E 2.4.4. a) 17990; b) -18248; c) 18248.

E 2.4.5. a) 3,75; b) -5,75.

E 2.4.7. a) 3,75; b) -5,75.

E 2.4.8. Devido à precisão finita do sistema de numeração, o laço para quando x for suficientemente grande em comparação a 1 a ponto de x+1 ser aproximado para 1. Isso acontece quando 1 é da ordem do épsilon de máquina em relação a x, isto é, quando $x \approx 2/\%eps$. O tempo de execução fica em torno de 28 anos.

$$\textbf{E 2.5.1. a)} \ \varepsilon_{abs} = 5.9 \times 10^{-4}, \ \varepsilon_{rel} = 1.9 \times 10^{-2}\%; \ \textbf{b)} \ \varepsilon_{abs} = \times 10^{-5}, \ \varepsilon_{rel} = \times 10^{-3}\%; \ \textbf{c)} \ \varepsilon_{abs} = 1, \ \varepsilon_{rel} = 10^{-5}\%.$$

E 2.5.2. a) 1,7889; b) 1788,9; c) 0,0017889; d) 0,0045966; e) $2,1755 \times 10^{-10}$; f) $2,1755 \times 10^{10}$.

E 2.5.3. a) 3270, 3280; b) 42,5, 42,6; c) 0,0000333, 0,0000333.

E 2.5.4. a) 2; b) 2.

E 2.5.5.

$$0.1x - 0.01 = 12 (2.84)$$

$$0.1x = 12 + 0.01 = 12.01 (2.85)$$

$$x = 120,1$$
 (2.86)

A resposta exata é 120,1.

$$\textbf{E 2.5.6. a) } \delta_{\mathrm{abs}} = 3,46 \times 10^{-7}, \ \delta_{\mathrm{rel}} = 1,10 \times 10^{-7}; \ \mathrm{b) } \ \delta_{\mathrm{abs}} = 1,43 \times 10^{-4}, \ \delta_{\mathrm{rel}} = 1,00 \times 10^{-3}.$$

 ${f E}$ 2.8.1. 2%, deve-se melhorar a medida na variável x, pois, por mais que o erro relativo seja maior para esta variável, a propagação de erros através desta variáveis é muito menos importante do que para a outra variável.

E 2.8.2. 3,2% pela aproximação ou 3,4% pelo segundo método, isto é, $(0.96758 \le I \le 1.0342)$.

E 2.9.1. Quando μ é pequeno, $e^{1/\mu}$ é um número grande. A primeira expressão produz um "overflow" (número maior que o máximo representável) quando μ é pequeno. A segunda expressão, no entanto, reproduz o limite 1 quando $\mu \to 0+$.

E 2.9.2. a)
$$\frac{1}{2} + \frac{x^2}{4!} + O(x^4)$$
; b) $x/2 + O(x^2)$; c) $5 \cdot 10^{-4}x + O(x^2)$; d) $\frac{\sqrt{2}}{4}y + O(y^2) = \frac{\sqrt{2}}{4}x + O(x^2)$

 ${f E}$ 2.9.3. A expressão da direita se comporta melhor devido à retirada do cancelamento catastrófico em x em torno de 0.

 ${\bf E}$ 2.9.4. Possíveis soluções são:

$$\sqrt{e^{2x} + 1} - e^x = \sqrt{e^{2x} + 1} - e^x \cdot \frac{\sqrt{e^{2x} + 1} + e^x}{\sqrt{e^{2x} + 1} + e^x}$$

$$= \frac{e^{2x} + 1 - e^{2x}}{\sqrt{e^{2x} + 1} + e^x} = \frac{1}{\sqrt{e^{2x} + 1} + e^x}$$
(2.212)

$$= \frac{e^{2x} + 1 - e^{2x}}{\sqrt{e^{2x} + 1} + e^x} = \frac{1}{\sqrt{e^{2x} + 1} + e^x}$$
 (2.213)

e, de forma análoga:

$$\sqrt{e^{2x} + x^2} - e^x = \frac{x^2}{\sqrt{e^{2x} + x^2} + e^x}.$$
(2.214)

E 2.9.5. $4,12451228 \times 10^{-16}$ J; 0,002%; $0,26654956 \times 10^{-14}$ J; 0,002%; $4,98497440 \times 10^{-13}$ J; 0,057%; $1,74927914 \times 10^{-12}$ J; 0,522%.

E 3.1.1.
$$p(x) = -3 + 2x + 5x^3$$
.

E 3.1.2.
$$p(x) = 0.25 + x^2$$
.

$$\int_0^1 P(x) dx = \frac{f(0) + f(1)}{2}, \ \frac{1}{12} \max_{x \in [0,1]} |f^{\prime \prime}(x)|$$