Cálculo Numérico A

Capítulo 1 – Introdução (Teoria dos Erros)

Erros, casas decimais significativas e algarismos significativos

Condicionamento de um problema e estabilidade de um método

Introdução a um programa computacional para a Análise Numérica

Introdução - Erros

A **Análise Numérica** é um ramo da **Matemática** onde se procuram construir algoritmos, com o objetivo de obter resultados numéricos de problemas relacionados com as mais variadas áreas da **Ciência.**

Estes problemas podem representar-se por modelos matemáticos precisos que, em situações ideais terão soluções exatas.

Contudo, devido ao facto de muitas vezes os dados provenientes dos problemas da vida real comportarem “discrepâncias” ou erros, ou haver uma incorreta adaptação dos modelos matemáticos utilizados, também os resultados numéricos resultantes do cálculo computacional apresentam distorções que podem ser significativas, resultando assim num completo desajustamento em termos de conclusões a tirar. Podemos sintetizar os vários tipos de **erros** que aparecem num problema físico que necessita ser tratado de uma forma matemática:

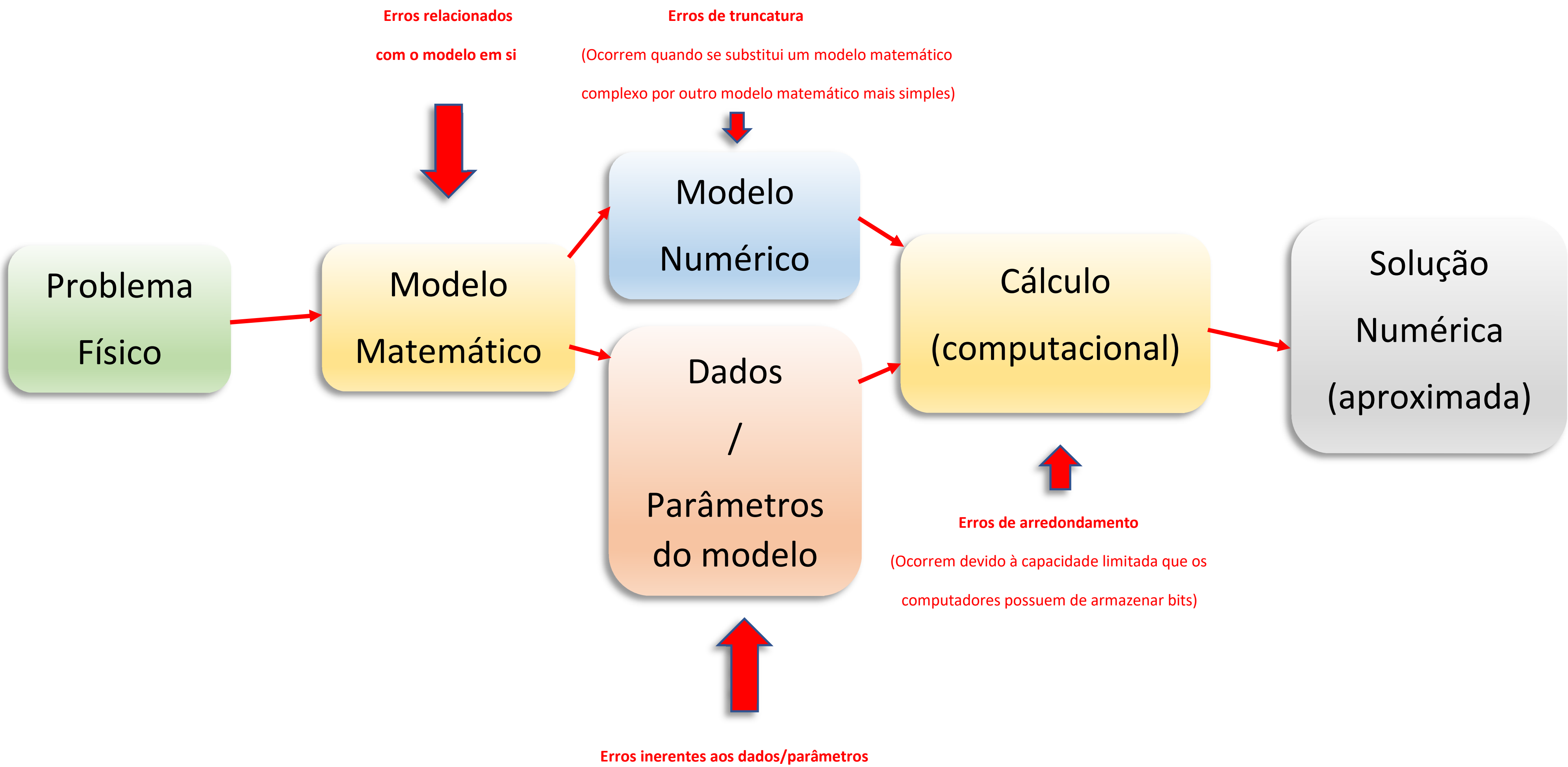
Erros iniciais do problema *(erros independentes do processo de cálculo)*

- → **Erros relativos ao modelo matemático escolhido**
- → **Erros provenientes dos dados iniciais**

Erros que ocorrem durante a aplicação de métodos numéricos *(erros que ocorrem durante o processo de cálculo)*

- → **Erros de arredondamento**
- → **Erros de truncatura**

Tipos de erros



Definições

Seja x $(x \neq 0)$ um valor exato e $\hat{x}$ um seu valor aproximado.

São válidas as seguintes definições:

Erro : $\boldsymbol{\varepsilon}_x = x - \hat{x}$

Erro absoluto : $|\boldsymbol{\varepsilon}_x| = |x - \hat{x}|$

Erro relativo : $\mathbf{r}_x = \frac{|x-\hat{x}|}{|x|}$ (mede a precisão do valor aproximado $\hat{x}$)

- Se $\boldsymbol{\varepsilon}_x > 0$, então $\hat{x}$ é um valor aproximado por defeito
- Se $\boldsymbol{\varepsilon}_x < 0$, então $\hat{x}$ é um valor aproximado por excesso

Consideremos η_x um majorante de $|\boldsymbol{\varepsilon}_x|$, isto é um valor tal que se verifique $|\boldsymbol{\varepsilon}_x| \leq \eta_x$.

Sendo assim tem-se $|x - \hat{x}| \leq \eta_x$, pelo que um intervalo que contém x é $I_x = [\hat{x} - \eta_x\,,\ \hat{x} + \eta_x]$.

Notações utilizadas para a determinação de $\boldsymbol{I_x}$

- $[\hat{x} - \eta_x\,,\ \hat{x} + \eta_x]$;
- $\hat{x} \pm \eta_x$;
- $\hat{x}\,(y)$, onde y representa o majorante do erro absoluto e significa $y \times 10^j$, sendo 10^j a grandeza mais pequena expressa em $\hat{x}$ (pode ser uma unidade $(j = 0)$, uma dezena $(j = 1)$, uma milésima $(j = -3)$, …).

Exemplo 1

Na determinação de x obteve-se o resultado 12.3 .

Então $|x - \hat{x}| \leq 0.5 \times 0.1 = 0.5 \times 10^{-1} = 0.05.$

Sendo assim $x \in [12.3 - 0.05\,,\ 12.3 + 0.05] = [12.25\,, 12.35]$.

Exemplo 2

Na determinação de x obteve-se o resultado 87.9 ± 0.07 .

Então $|x - \hat{x}| \leq 0.07.$

Sendo assim $x \in [87.9 - 0.07\,,\ 87.9 + 0.07] = [87.83\,, 87.97]$.

Exemplo 3

Na determinação de x obteve-se o resultado $400.32\ (6)$.

Então $|x - \hat{x}| \leq 6 \times 0.01 = 6 \times 10^{-2} = 0.06$.

Sendo assim $x \in [400.32 - 0.06\,, 400.32 + 0.06]$ =

= $[400.26\,, 400.38]$.

Exemplo 4 (Erro absoluto e erro relativo)

Sejam $x = \frac{1}{17}$ e $\hat{x} = 0.059$.

Então:

- $|\boldsymbol{\varepsilon}_x| = |x - \hat{x}| = 0.000176\ldots \leq 0.000177 = 0.177 \times 10^{-3}$.
- $\mathbf{r}_x = \frac{|x-\hat{x}|}{|x|} \leq \frac{0.177\times 10^{-3}}{\frac{1}{17}} = 0.3009 \times 10^{-2}$.

Definições

Seja x $(x \neq 0)$ um valor exato e $\hat{x}$ um seu valor aproximado.

$\Longrightarrow$ Dizemos que $\hat{x}$ aproxima x com, no mínimo, $\boldsymbol{k}$ $(\boldsymbol{k} \in \mathbb{N}_0)$ **casas decimais significativas** se e só se

$$|\boldsymbol{\varepsilon}_x| \leq 0.5 \times 10^{-\boldsymbol{k}}.$$

$\Longrightarrow$ Dizemos que $\hat{x}$ aproxima x com $\boldsymbol{n}$ **algarismos significativos** se

$$|\boldsymbol{\varepsilon}_x| \leq 0.5 \times 10^{m+1-\boldsymbol{n}}\,,\ \boldsymbol{n} \in \mathbb{N}_0\,,\ m \in \mathbb{Z}\,,$$

onde m é tal que $10^m \leq |x| < 10^{m+1}$.

Exemplo 5 (Casas decimais significativas e algarismos significativos)

Na determinação de x obteve-se o resultado $0.001773(8)$.

Então $|x - \hat{x}| = |\boldsymbol{\varepsilon}_x| \leq 8 \times 0.000001 = 0.000008 = 0.8 \times 10^{-5} \leq$ $\leq 0.5 \times 10^{-\mathbf{4}}$ $(k = 4)$, pelo que $\hat{x}$ tem, pelo menos, $\mathbf{4}$ casas decimais significativas.

Por outro lado, tem-se

$$0.001 = 10^{-3} \leq |x| \approx |\hat{x}| < 0.01 = 10^{-\mathbf{2}},$$

pelo que $m + 1 = -2$.

Como $m + 1 - n = -k \Leftrightarrow -2 - n = -4 \Leftrightarrow n = 4 - 2 = 2$,

$\hat{x}$ tem **2** algarismos significativos que são: 0.001773.

Condicionamento de um problema

Fórmula fundamental do cálculo de erros

(Efeito da propagação de erros)

Seja x um valor exato e $\hat{x}$ um seu valor aproximado.

Considere-se ainda uma função $g(x)$ definida numa vizinhança de x que contenha $\hat{x}$.

- Pode colocar-se a seguinte questão:

  De que forma é influenciado o valor de $g(x)$ quando se substitui x por $\hat{x}$, isto é, quais são as discrepâncias cometidas, em termos de erro (absoluto ou relativo), ao calcular $g(\hat{x})$?

Propagação do erro absoluto

Seja g uma função diferenciável numa vizinhança $V_\delta(x)$ de x.

Utilizando a fórmula de Taylor tem-se:

$g(x) = g(\hat{x}) + g'(\xi)(x - \hat{x})$, onde ξ está situado entre x e $\hat{x}$.

Mas $g(x) = g(\hat{x}) + g'(\xi)(x - \hat{x}) \quad \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow \quad g(x) - g(\hat{x}) = g'(\xi)(x - \hat{x}) \quad \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{g(x)} = g'(\xi)(x - \hat{x}) = g'(\xi)\, \boldsymbol{\varepsilon}_x$.

Utilizando módulos na igualdade anterior, podemos concluir:

Fórmula fundamental do cálculo dos erros

$$\left|\boldsymbol{\varepsilon}_{g(x)}\right| \leq M_1 . \left|\boldsymbol{\varepsilon}_x\right| \ ,$$

onde $|g'(z)| \leq M_1 \ , z \in V_\delta(x)$.

Nota

A fórmula anterior "só" nos informa, em termos absolutos, de que forma o erro na variável x se propaga na função g quando se substitui x por $\hat{x}$, não nos fornecendo, porém, qual a precisão (rigor) desta medição $(g(\hat{x}))$.

Propagação do erro relativo

Consideremos novamente uma função g, mas de classe $C^2\big(V_\delta(x)\big)$, onde $V_\delta(x)$ é uma vizinhança de x.

Utilizando uma vez mais a fórmula de Taylor (alternando os valores x e $\hat{x}$), tem-se:

$g(\hat{x}) = g(x) + g'(x)(\hat{x} - x) + \frac{g''(\theta)(\hat{x}-x)^2}{2}$, onde θ está situado entre x e $\hat{x}$.

Ora, supondo que x e $\hat{x}$ são valores muito próximos entre si, ao desprezar $(\hat{x} - x)^2$ obtemos

$$g(\hat{x}) \approx g(x) + g'(x)(\hat{x} - x) \quad \Leftrightarrow \quad g(\hat{x}) - g(x) \approx g'(x)(\hat{x} - x) ,$$

donde se poder concluir

$$|g(\hat{x}) - g(x)| \approx |g'(x)||\hat{x} - x| \quad \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow \quad |g(x) - g(\hat{x})| \approx |g'(x)||x - \hat{x}|.$$

Assumindo ainda que x e $g(x)$ não se anulam em $V_\delta(x)$,

podemos escrever $\frac{|g(x)-g(\hat{x})|}{|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})|} \approx |\boldsymbol{x}| \frac{|g'(x)|}{|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})|} . \frac{|x-\hat{x}|}{|\boldsymbol{x}|}$, isto é :

$$\boxed{\mathbf{r}_{g(x)} \approx \left|\frac{xg'(x)}{g(x)}\right| \mathbf{r}_x} \ .$$

Definição

Designa-se por **número de condição de uma função g num ponto x** a quantidade

$$C_g(x) = \left|\frac{x g'(x)}{g(x)}\right| \quad , \quad g(x) \neq 0 \, .$$

Exemplo 6

Seja $g_1(x) = x^x \ (x > 0)$.

Então $C_{g_1}(x) = x\,|ln(x) + 1|$.

Como exemplo sabe-se que $C_{g_1}(0.5) = 0.5\,|ln(0.5) + 1\,| \ \approx\ 0.153$.

Conclui-se que a função g_1 é bem condicionada para valores de x perto de 1.

Exemplo 7

Seja $g_2(x) = x - s \;\; (s \in \mathbb{R} \setminus \{0\})$.

Então $C_{g_2}(x) = \left|\frac{x}{x-s}\right|$.

Como exemplo, se $x = e$, $s = 2.718$ e $\hat{x} = 2.719$, tem-se

$$\mathbf{r}_x = \frac{|x-\hat{x}|}{|x|} \approx 2.64201 \times 10^{-4} \text{ e } \mathbf{r}_{g_2(x)} \approx \frac{|g_2(x)-g_2(\hat{x})|}{|g_2(x)|} \approx 2.548258 ,$$

pelo que $\frac{\mathbf{r}_{g_2(x)}}{\mathbf{r}_x} = C_{g_2}(x) \approx 9645.164$.

Repare-se que, neste caso, $g_2''(x) = 0$.

- Pode concluir-se que a função g_2 é mal condicionada para valores de x próximos de s. Designa-se esta situação por **cancelamento subtrativo**.

Definição

Um **problema** diz-se **bem condicionado** se pequenas variações nos dados iniciais e/ou parâmetros do modelo matemático utilizado derem origem a pequenas variações na solução.

Se a situação inversa ocorrer, então o **problema** diz-se **mal condicionado**.

Nota

O condicionamento de um problema é independente do método numérico utilizado para a sua resolução.

Exemplo 8

Considere-se a equação $x^2+\frac{1}{3}x+\frac{1}{36}=0$ que admite uma raiz real dupla $x=-\frac{1}{6}$.

Ao alterar ligeiramente o coeficiente em x, substituindo $\frac{1}{3}$ por 0.33333333, obtemos a equação $x^2+0.33333333x+\frac{1}{36}=0$ que não admite raízes reais.

Repare-se que, neste caso, se considerarmos $b=\frac{1}{3}$ e $\hat{b}=0.33333333$, se tem $b-\hat{b}\approx 0$ e $\mathbf{r}_b=\frac{|b-\hat{b}|}{|b|}\approx 1\times 10^{-8}$.

- Pode concluir-se que o problema da resolução de uma equação do 2º grau do tipo $ax^2 + bx + c = 0$, com $a \; (a \neq 0)$, b e $c \in \mathbb{R}$, quando se utiliza a fórmula resolvente $x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$, é um problema mal condicionado.

Isso deve-se ao facto de que ocorre uma situação de cancelamento subtrativo na utilização desta fórmula quando $b^2 \approx 4ac$.

Estabilidade de um método

Definição

Um **método numérico** diz-se **estável** se a acumulação de erros nos cálculos intermédios não afetar significativamente o resultado final.

Se a situação inversa ocorrer, então o **método numérico** diz-se **instável**.

Exemplo 9

Considerem-se as funções (matematicamente iguais):

$$f(\theta) = \frac{tg^2(\theta)}{\theta^2} \qquad e \qquad g(\theta) = \frac{1-cos(2\theta)}{\theta^2(1+cos(2\theta))}.$$

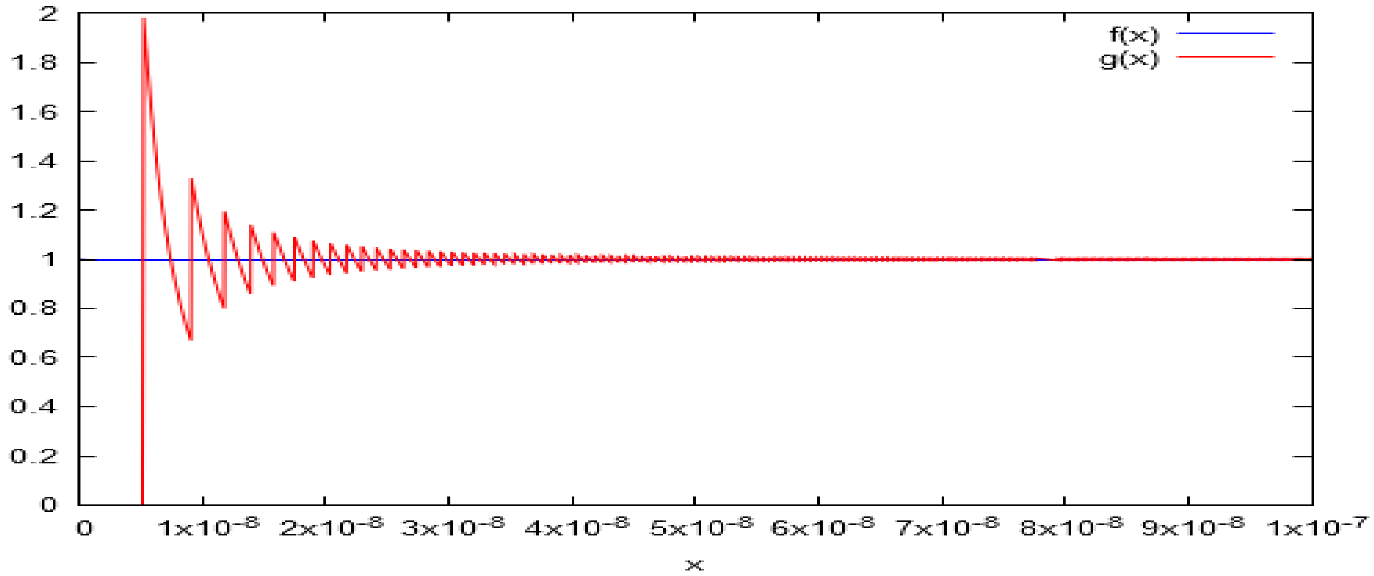
Sabe-se que $\lim_{\theta \to 0} f(\theta) = \lim_{\theta \to 0} g(\theta) = 1.$

A tabela que se segue permite comparar os valores de $f(\theta)$ e $g(\theta)$, obtidos computacionalmente, para diferentes valores de θ perto de 0 (zero) e cada vez mais próximos de 0 (zero):

$\boldsymbol{\theta}$	$\boldsymbol{f(\theta)}$	$\boldsymbol{g(\theta)}$
0.1	1.00670464	1.00670464
0.01	1.00006667	1.00006667
0.001	1.00000067	1.00000067
0.0001	1.00000001	1
0.00001	1	1.00000008
0.000001	1	0.99997788
0.0000001	1	0.99920072
0.00000001	1	1.11022302
0.000000001	1	0
0.0000000001	1	0

⋮	✓	✗

Por outro lado, o gráfico conjunto das funções $f(\theta)$ e $g(\theta)$, obtido no intervalo $[10^{-10}, 10^{-7}]$, ilustra bem a diferença, em termos de estabilidade, dos algoritmos definidos pelas expressões analíticas de f e g.



Podemos concluir que o algoritmo utilizado para calcular valores de f perto de 0 é **estável**, enquanto o algoritmo utilizado para calcular valores de g perto de 0 é **instável**.