INSTITUTO FEDERAL
SANTA CATARINA

INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE SANTA CATARINA
CAMPUS FLORIANÓPOLIS
DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE ELETRÔNICA

COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA

Prof. Marco Valério Miorim Villaça

Capítulo I

Erros em representações numéricas
e
aritmética em ponto flutuante

Parte II - Erros de truncamento e erro numérico total

Erros de truncamento
Definição

- Erros de truncamento são os erros resultantes do uso de uma aproximação no lugar de uma solução matemática exata

  Exemplo, a aproximação da derivada da velocidade por uma equação de diferenças finitas da forma

$$\frac{dv}{dt} \approx \frac{\Delta v}{\Delta t} = \frac{v(t_{i+1}) - v(t_i)}{t_{i+1} - t_i}$$

Exercício

- A aceleração a que está submetido um saltador de bungee jumping é descrita pela seguinte equação diferencial:

$$\frac{dv}{dt} = g - \frac{cd}{m} \cdot v^2$$

onde, *v* é a velocidade em m/s, *t* é o tempo em s, *g* é a aceleração da gravidade (9,80665 m/s^2), c_d é o coeficiente de arrasto concentrado em kg/m e *m* é a massa do saltador em kg.

A solução analítica da equação diferencial é

$$v(t) = \sqrt{\frac{g \cdot m}{c_d}} \cdot \tanh\left(\sqrt{\frac{g \cdot c_d}{m}} \cdot t\right) \quad (m/s)$$

Exercício

Para resolver numericamente a ED, utiliza-se a a aproximação por diferenças finitas:

$$\frac{v(t_{i+1})-v(t_i)}{t_{i+1}-t_i}=g-\frac{cd}{m}\cdot v^2$$

Isolando-se $v(t_{i+1})$ na equação acima, resulta:

$$v(t_{i+1})=v(t_i)+\left[g-\frac{cd}{m}\cdot v(t_i)^2\right](t_{i+1}-t_i)$$

ou

$$v_{i+1}=v_i+\left[g-\frac{cd}{m}\cdot v(t_i)^2\right]\Delta t$$

onde, Δt é o passo de cálculo

Exercício

- Pede-se
  - Faça um script Scilab que plote o gráfico de v(t) usando as soluções analíticas e numéricas, do instante t = 0 até t = 12 s, com intervalos de 0,5 s.

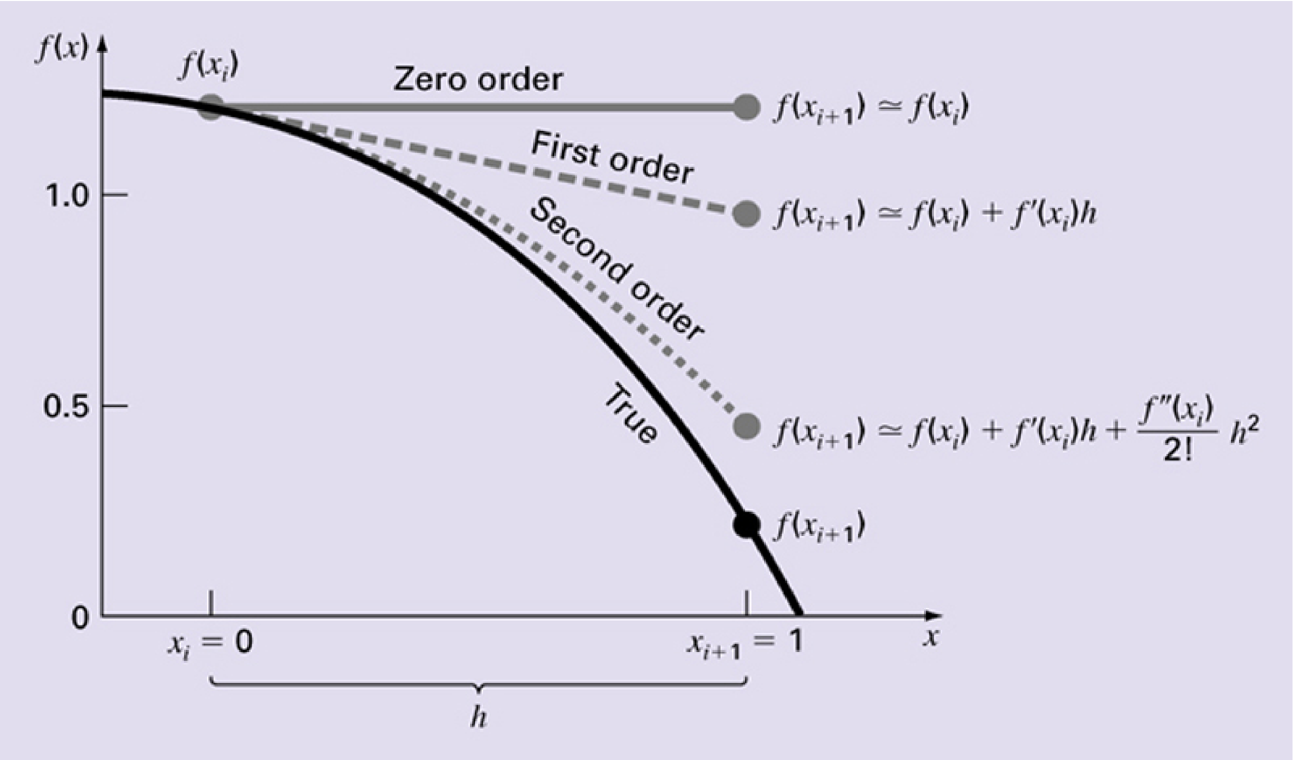
    Considere m = 60 kg, g = 9,80665 m/s^2 e c_d = 0,25 kg/m
  - Calcule, ainda, o erro relativo percentual verdadeiro em t = 12.
  - Como tarefa de casa, demonstre a solução analítica.

Series de Taylor

- A função suave é uma função que tem derivadas contínuas até alguma ordem desejada sobre algum domínio.
- O Teorema de Taylor estabelece que qualquer função suave pode ser aproximada por um polinômio.
- As séries de Taylor fornece um meio para expressar essa ideia matematicamente.

Series de Taylor

- $f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}h^3 + \ldots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}h^n + R_n$
- $h = x_{i+1} - x_i$
- O resto é incluído p/ representar todos os termos a partir de *n+1*



Aproximação de $f(x) = -0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$ em $x = 1$ por expansão em séries de Taylor.
Fonte: Capra, 2013, p. 105

Séries de Taylor
Fórmula de Taylor com resto de Lagrange

- Se *f : [a,b]* $\rightarrow$ *R* é uma função com *n* derivadas contínuas e f^{n+1} definida em todo (a,b). Seja $x_0 \in [a,b]$ então existe ξ entre x_i e x_{i+1} tal que

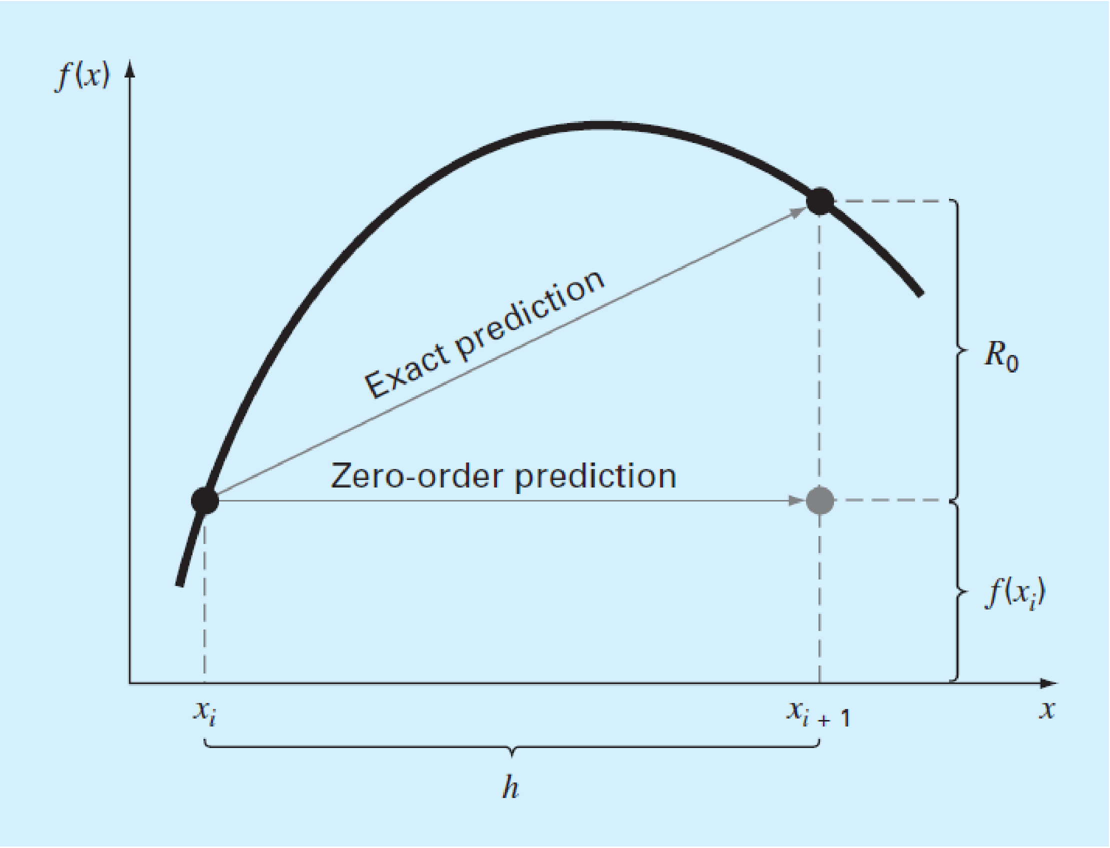
$$f(x_{i+1}) = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_i)}{k!} h^k + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{n+1!} h^{n+1}$$

sendo

$$\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{n+1!} h^{n+1} = R_n$$

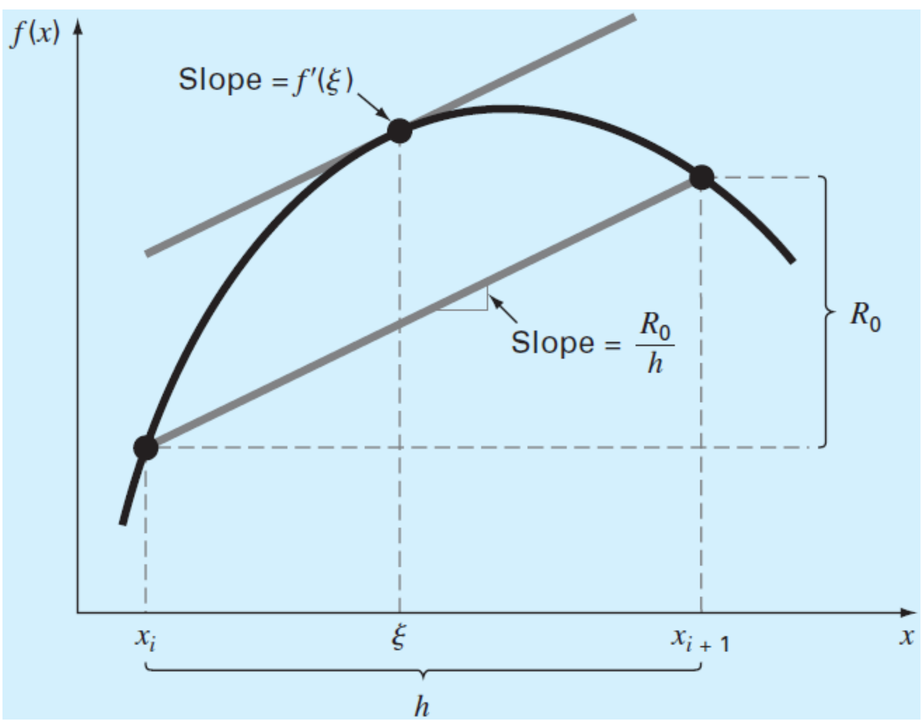
Séries de Taylor
Análise do resto

- Se $f\left(x_{i+1}\right) \approx f\left(x_i\right)$,
- O resto será $R_0 = f'\left(x_i\right)h + \frac{f''\left(x_i\right)}{2!}h^2 + \frac{f^{(3)}\left(x_i\right)}{3!}h^3 + \ldots + \frac{f^{(n)}\left(x_i\right)}{n!}h^n + R_n$



Séries de Taylor
Análise do resto

- Segundo o Teorema do Valor Médio, se uma função f(x) e sua derivada primeira forem contínuas em um intervalo entre x_i e x_{i+1}, então pelo menos um ponto em f(x), denotado por f ' (ξ), tem uma inclinação paralela a reta que une $f(x_i)$ e $f(x_{i+1})$.



Assim, para a aprox. de ordem 0:

$$f'(\xi) = \frac{R_0}{h} \longrightarrow R_0 = f'(\xi)\, h$$

Estendendo, para ordens superiores

$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{n+1!} h^{n+1}$$

Séries de Taylor
Exercício

- Se h for suficientemente pequeno, poucos termos serão suficientes para se obter uma estimativa adequada, conforme pode-se visualizar no exercício a seguir.

Com o auxílio de um script Scilab, use expansões em série de Taylor com n = 0 até 6 para aproximar $f(x) = \cos x$ em $x_{i+1} = \pi/3$ com base no valor de $f(x)$ e suas derivadas em $x_i = \pi/4$

Note que $h = \pi/3 - \pi/4$

Calcule o erro relativo para cada expansão.

Séries de Taylor

Estimativa do erro de truncamento

- Seja a expansão em série de Taylor de f(x):

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}h^3 + \ldots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}h^n + R_n$$

Truncando-se a partir do termo de primeira ordem:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + R_1$$

Isolando-se f '(x):

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} + \frac{R_1}{(x_{i+1} - x_i)}$$

Aproximação de primeira ordem

Erro de truncamento

Séries de Taylor
Estimativa do erro de truncamento

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} + \frac{R_1}{(x_{i+1} - x_i)}$$

Como

$$R_1 = \frac{f^{('')}(\xi)}{2!}(x_{i+1} - x_i)^2$$

O erro de truncamento pode ser expresso por

$$\frac{R_1}{x_{i+1} - x_i} = \frac{f^{('')}(\xi)}{2!}(x_{i+1} - x_i)$$

ou

$$\frac{R_1}{x_{i+1} - x_i} = O(x_{i+1} - x_i)$$

Séries de Taylor
Derivação numérica

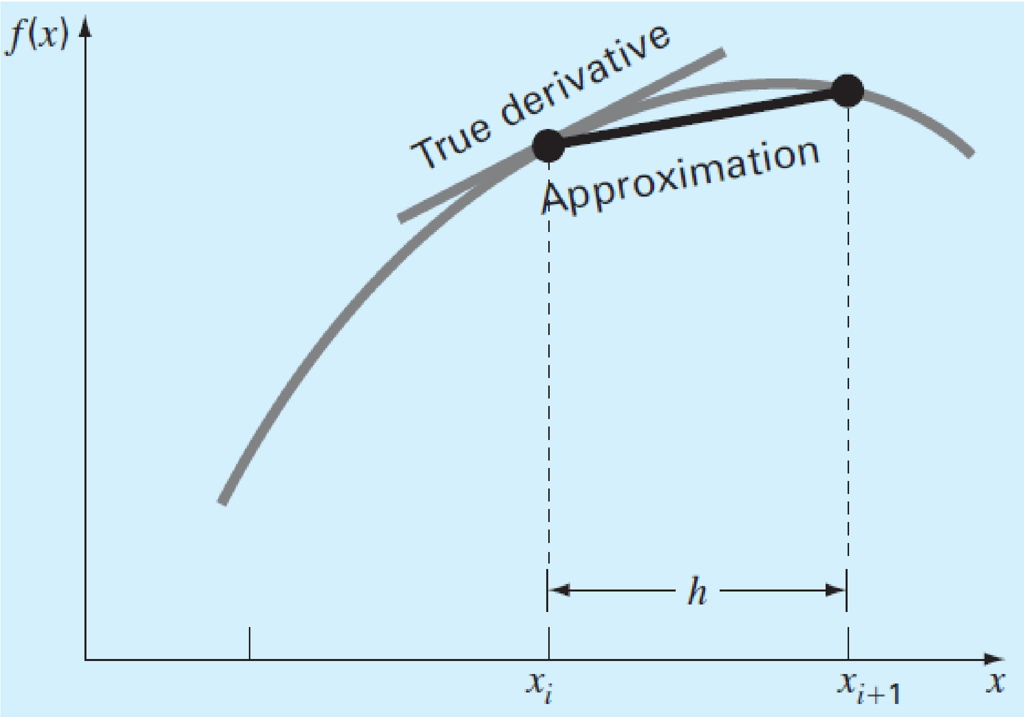
$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} + \frac{R_1}{(x_{i+1} - x_i)}$$

- A expressão acima é chamada de *diferença finita dividida* e é representada em geral por

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h)$$

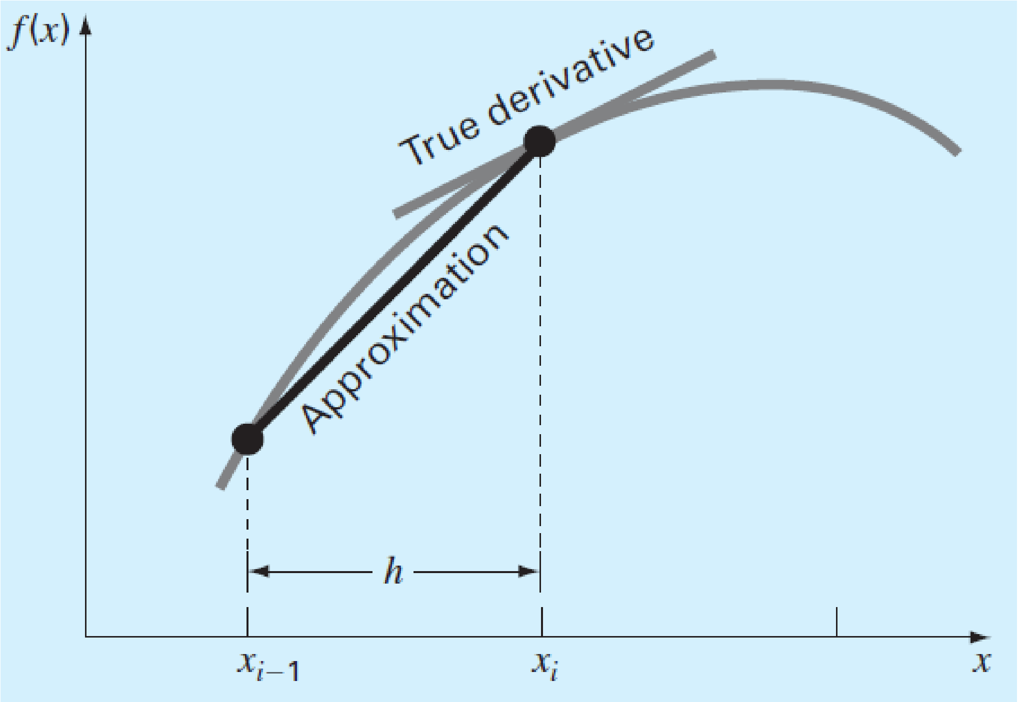
onde h é chamado de *tamanho do passo*

Séries de Taylor
Derivação numérica



Aproximação da derivada primeira
por diferenças regressiva

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + O(h)$$

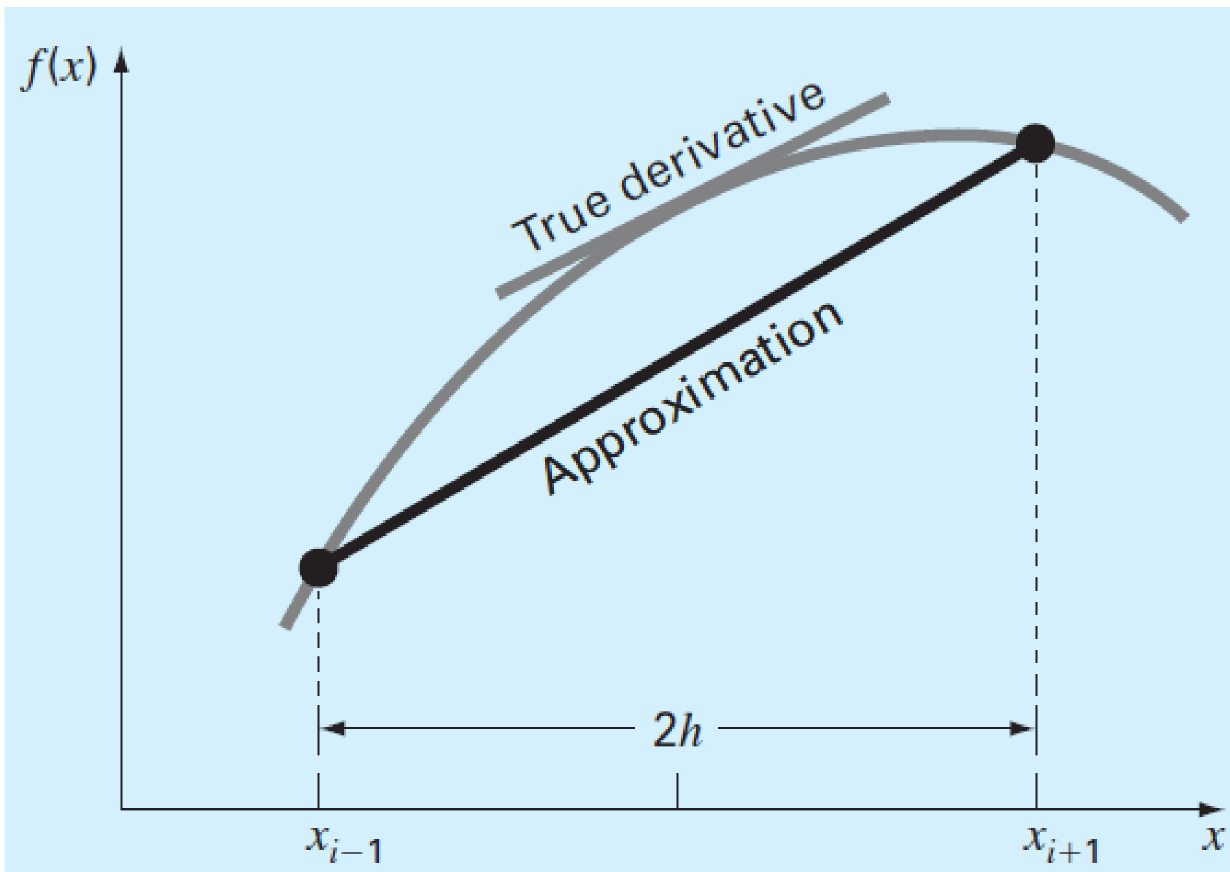


Aproximação da derivada primeira
por diferenças progressiva

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h)$$

Séries de Taylor
Derivação numérica

Aproximação da primeira derivada por diferença centrada



Séries de Taylor
Derivação numérica

Aproximação da primeira derivada por diferença centrada

- Expansão da série de Taylor progressiva

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}h^3 + \dots$$

- Expansão da série de Taylor regressiva

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 - \frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}h^3 + \dots$$

Subtraindo a primeira equação da segunda

$$f(x_{i+1}) = f(x_{i-1}) + 2f'(x_i)h \; - 2\frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}h^3 + \dots$$

Séries de Taylor
Derivação numérica

$$f(x_{i+1}) = f(x_{i-1}) + 2f'(x_i)h \ + 2\frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}h^3 + \ldots$$

Isolando-se f '(x) na expressão acima:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2\mathrm{h}} \ - \frac{f^{(3)}(x_i)}{6}h^2 + \ldots$$

ou

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2\mathrm{h}} \ - O(h^2)$$

Nesse caso, o erro de truncamento é da ordem de h^2 em oposição as aproximações regressiva e progressiva que eram da ordem de h, sendo assim mais exata.

Séries de Taylor
Derivação numérica

- Exercício

  Use a aproximação por diferenças progressiva e regressiva de O(h) e uma aproximação por diferença centrada de $O(h^2)$ para estimar a derivada primeira de

  $$f(x) = 25x^3 – 6x^2 + 7x - 88$$

  Avalie a derivada em x = 2 usando o passo de cálculo de 0,5 e 0,25. Compare as suas estimativas com o valor real da derivada. Interprete seus resultados com base no resto da expansão em séries de Taylor.
- Calcule manualmente e com o auxilio de um script Scilab

Séries de Taylor
Derivação numérica

- Dica:

  Início do script:

```
xi = input('Entre com o valor de xi: ');
h = input('Entre com o passo de cálculo: ');
disp('Entre com os coef da f. polinomial entre ')
vetor = input(' no formato [a0 a1 ... an] : ');
f = poly(vetor,'x','c');
disp(f, 'f(x)');
flinha = derivat(f);
disp(flinha,'f´(x)');
…
```

Séries de Taylor
Derivação numérica

Aproximações por diferenças finitas de derivadas superiores

- Expansão da série de Taylor progressiva para *f(x_{i+2})*

$$f(x_{i+2}) = f(x_i) + f'(x_i)\,2\mathrm{h} + \frac{f''(x_i)}{2!}(2\mathrm{h})^2 + \ldots$$

- Lembrando que

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)\,h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \ldots$$

Subtraindo a primeira equação da segunda multiplicada por 2

$$f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) = -f(x_i) + \quad f''(x_i)\,h^2 + \ldots$$

Séries de Taylor
Derivação numérica

Aproximações por diferenças finitas de derivadas superiores

$$f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) = -f(x_i) + \ f''(x_i)h^2 + \ldots$$

- Truncando-se a partir do termo de segunda ordem e isolando-se *f ''(x), obtém-se*

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} + O(h)$$

relação chamada de *segunda diferença dividida finita progressiva*

Séries de Taylor
Derivação numérica

Aproximações por diferenças finitas de derivadas superiores

- *Segunda diferença dividida finita regressiva*

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2} + O(h)$$

- *Segunda diferença dividida finita centrada*

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} + O(h^2)$$

que pode ser expressa pela diferença de duas diferenças divididas da 1ª derivada

$$f''(x_i) \approx \frac{\dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \dfrac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}}{h}$$

Séries de Taylor
Derivação numérica

- Exercício

  Use uma aproximação por diferença centrada de $O(h^2)$ para estimar a derivada segunda da função

  $$f(x) = -0{,}1x^4 - 0{,}15x^3 - 0{,}5x^2 - 0{,}25x + 1{,}2$$

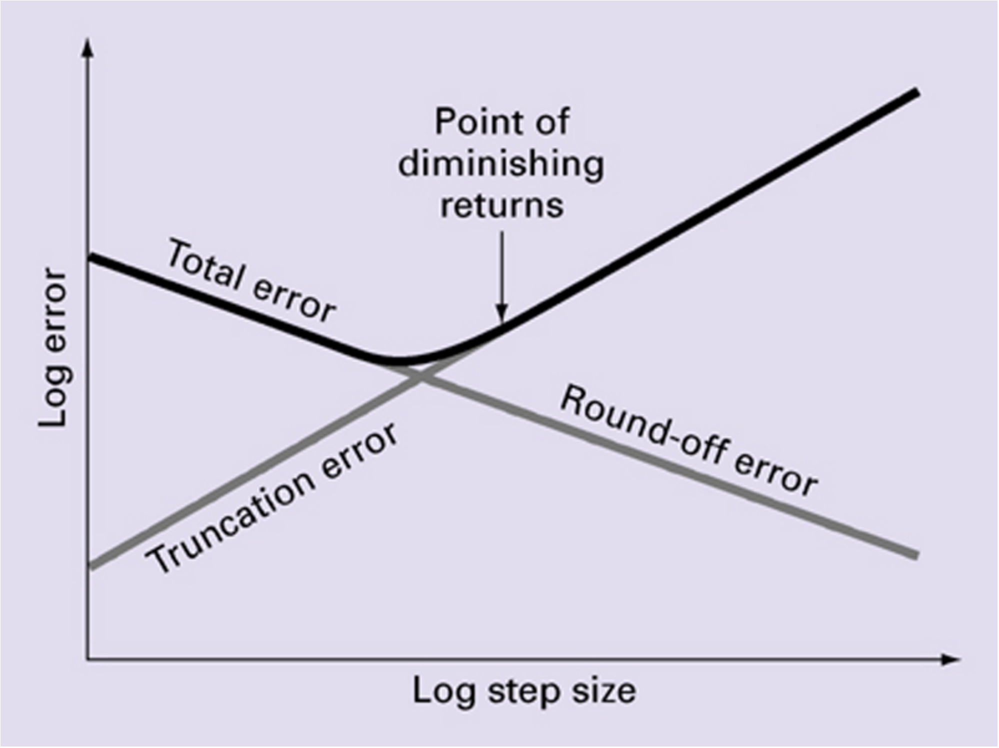
- Faça o cálculo em $x = 0{,}5$, utilizando os passos de cálculo $h = 0{,}5$ e $0{,}25$ e compare as estimativas com o valor verdadeiro da derivada. Interprete os resultados com base no termo do resto da expansão em série de Taylor.

Erro numérico total
(Erro total)

- Erro total = erro truncamento + erros arredondamento
- Erro de arredondamento:
  - Minimiza-se com o aumento do número de algarismos significativos;
  - Podem aumentar por:
    - Cancelamentos na subtração;
    - Número de cálculos da análise
- Erro de truncamento:
  - Minimiza-se com a diminuição do passo, o que leva a aumentar o erro de arredondamento

Erro numérico total
(Erro total)

- O gráfico mostra que existe um passo de cálculo apropriado, chamado de "ponto de retorno diminuído", onde o erro de arredondamento começa a neutralizar as vantagens da redução do passo de cálculo.



Erro numérico total
(Erro total)

- Uma aproximação por diferença centrada para a derivada primeira pode ser escrita como:

$$f'(x_i) = \underbrace{\frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2\mathrm{h}}}_{\text{Aproximação de primeira ordem}} \underbrace{- \frac{f^{(3)}(\xi)}{6} h^2}_{\text{Erro de truncamento}}$$

Devido ao uso de computadores digitais, os valores da função incluem o erro de arredondamento, como em:

$$f(x_{i-1}) = \tilde{f}(x_{i-1}) + e_{i-1}$$
$$f(x_{i+1}) = \tilde{f}(x_{i+1}) + e_{i+1}$$

onde os $\tilde{f}\,'s$ são os valores arredondados e os *e's* são os erros de arredondamento associados

Erro numérico total
(Erro total)

- Acrescentando os erros de arredondamento a equação da aproximação, resulta

$$f'(x_i) = \underbrace{\frac{\tilde{f}(x_{i+1}) - \tilde{f}(x_{i-1})}{2h}}_{\text{Aproximação de primeira ordem}} + \underbrace{\frac{e_{i+1} - e_{i-1}}{2h}}_{\text{Erro de arredondamento}} - \underbrace{\frac{f^{(3)}(\xi)}{6} h^2}_{\text{Erro de truncamento}}$$

- Assumindo que:
  - O valor absoluto de cada componente do erro de arredondamento tenha um limite superior ε, o valor máximo de $e_{i+1} - e_{i-1}$ será 2ε;
  - O valor da derivada terceira tenha um valor absoluto máximo de M

Erro numérico total
(Erro total)

- Um limite superior do valor absoluto do erro total pode ser representado por

$$ERRO\quad TOTAL=\left|\, f'(x_i)-\frac{\tilde{f}(x_{i+1})-\tilde{f}(x_{i-1})}{2\text{h}}\,\right| \leq \frac{\varepsilon}{h}+\frac{M}{6}h^2$$

- Derivando – se a equação acima e igualando a zero (ponto de mínimo), obtém um tamanho de passo ótimo (prove) :

$$h_{otm}=\sqrt[3]{\frac{3\,\varepsilon}{M}}$$

Erro numérico total
Exercício

- Utilize uma aproximação por diferença centrada de $O(h^2)$ para estimar a derivada primeira da função a seguir em $x = 0{,}5$.

$$f(x) = -0{,}1x^4 - 0{,}15x^3 - 0{,}5x^2 - 0{,}25x + 1{,}2$$

- Faça o cálculo iniciando com $h = 1$ e divida progressivamente o tamanho do passo por um fator 2 para demonstrar que o erro de arredondamento torna-se dominante à medida que o tamanho do passo é reduzido. Com o auxílio de um gráfico *erro total x h*, relacione os resultados obtidos com a equação de h_{otm}.

Outras fontes de erro
(antes da computação)

- Enganos – atribuídos ao ser humano, podem ocorrer em qualquer estágio do processo de modelagem, afetando todas as outras componentes de erro.
- Erros de formulação – atribuídos a modelos matemáticos incompletos, levando a resultados inapropriados
- Incerteza nos dados – As incertezas (ou erros) cometidas nas leituras das grandezas diretas, relacionadas com a precisão dos instrumentos de medida e com o próprio método experimental, propagam-se através das equações que traduzem as leis físicas que se supõem descrever os fenómenos em análise e vão afetar a precisão com que as grandezas indiretas são calculadas.

Bibliografia e crédito das figuras

- CHAPRA, Steven. Applied numerical methods with MATHLAB for engineers and scientists. McGrawHill, 2012.