Erros de arredondamento

- O conjunto R dos números reais é infinito, contínuo e ilimitado. O subconjunto F dos números que se podem representar exatamente num computador digital é finito, discreto e limitado.
- Seja $[x_-, x_+]$ um intervalo real onde x_+ é o **sucessor** de x_- em \mathscr{T} ; um número x de $]x_-$, x_+ [é representado por x_- ou x_+ [nota: usaremos fl(x) para representar o valor arredondado de x].
- |x fl(x)| erro **absoluto** devido ao arredondamento
- \square $\frac{|x-fl(x)|}{|x|}$ erro **relativo** devido ao arredondamento [x não nulo]
- Os erros de arredondamento podem ter efeitos catastróficos.

Erros catastróficos: exemplo

- No dia 25 de Fevereiro de 1991, durante o confito que resultou da invasão do Koweit por tropas iraquianas (Guerra do Golfo), uma bateria de misseis norte-americanos Patriot cuja missão era a de proteger uma instalação militar em Daharan, na Arábia Saudita, falhou a intercepção de um míssil Scud, lançado pelas forças militares iraquianas. O Scud atingiu um aquartelamento das tropas americanas provocando 28 mortos e um número elevado de feridos.
- A origem do problema foi a propagação de um erro de arredondamento no computador da bateria dos misseis Patriot.
- O sistema de controle do Patriot usava como unidade de tempo a décima parte do segundo; o número 0.1 não tem representação binária exata. O Patriot tinha registos de ponto fixo com 24 bits:

$$fl(0.1) = 0.0001100110011001100 1100 ...$$

Erro de arredondamento (absoluto)

$$|0.1 - fl(0.1)| = 2^{-24} + 2^{-25} + 2^{-28} \dots = 9.5 * 10^{-8}$$

Continuação do exemplo

- É este pequeno erro $9.5 * 10^{-8}$ que se vai propagar e causar o problema. A bateria estava ligada há cerca de 100 horas.
- Unidades (em décimos de segundo) de tempo: 3 600 000 (=100 *60 *60 *10)
- □ $3600000 * 9.5 * 10^{-8}$ segundos = 3.4 segundos
- O Scud tinha uma velocidade de 1.676 metros por segundo e portanto percorria mais de 500 metros num intervalo de tempo de 0:34 segundos. Este facto fez com que o Patriot falhasse a interceção do míssil iraquiano.

Este desastre e outros também causados por problemas de software numérico podem ser encontrados em http://www.math.psu.edu/dna/disasters

Mais exemplos de erros de arredondamento

Em aritmética exacta, as condições x > 0 e 1 + x > 1 são equivalentes mas, no Matlab,

dá o valor lógico 1 (a proposição é verdadeira) mas

dá o valor lógico 0 (a proposição é falsa).

Mais exemplos de erros de arredondamento

 O Matlab não consegue calcular o valor exato da soma de 10 parcelas todas iguais a 0.1

```
>> x = 0:1 *ones(10; 1)
```

[vector com 10 entradas todas iguais à unidade; em geral, >> ones(m; n) produz uma matriz com m linhas e n colunas e entradas todas iguais à unidade].

```
>> sum(x)
```

produz o resultado 1.0000

>> ans-1

dá **-1.1102e-16**

Mais exemplos de erros de arredondamento

 A adição e multiplicação de números reais são associativas e a multiplicação é distributiva em relação à adição mas, no Matlab, com

$$>> x = 0.1; y = 0.3; z = 0.7;$$

as condições

$$(x + z) + y = = x + (z + y)$$

$$(x *y) *z = = x *(y *z)$$

$$x *(y + z) = = (x *y) + (x *z)$$

produzem no Matlab o valor lógico 0 (falso)

Cálculo numérico versus cálculo algébrico

- Um sistema algébrico representa os números racionais na forma de um quociente de dois inteiros e opera com eles usando as regras aritméticas apropriadas. O preço que se paga por isto é que o sistema usa mais memória para a representação dos números e a aritmética é "mais pesada".
- Num sistema de cálculo algébrico, obtém-se

$$\sum_{n=1}^{100} \frac{1}{n} = \frac{14\ 466\ 636\ 279\ 520\ 351\ 160\ 221\ 518\ 043\ 104\ 131\ 447\ 711}{2788\ 815\ 009\ 188\ 499\ 086\ 581\ 352\ 357\ 412\ 492\ 142\ 272}$$

e a soma dos inversos aritméticos dos 200 primeiros números inteiros positivos produz um numerador e denominador com 90 algarismos.

Cálculo numérico e cálculo algébrico são ferramentas, ambas com vantagens e inconvenientes, que se complementam. O cálculo numérico continua a ser mais usado na computação científica mas existem códigos híbridos [numérico+algébrico].

O ponto flutuante

- Na representação de números em **ponto flutuante**, um número x representa-se por $x = \pm \, \mathbf{m} * \beta^e \qquad \qquad (1)$ onde m é a mantissa e e (inteiro positivo ou negativo) é o expoente.
- Valores típicos de β são 2 (sistema binário), 8 (sistema octal), 10 (decimal) e 16 (hexadecimal).
- \square Para o mesmo número x há muitas representações da forma (1). Por exemplo,

$$x = 0.2335 = 0.02335 * 10^{1} = 23.35 * 10^{-2} = \cdots$$

Obviamente, para adicionar dois números há que garantir que as representações têm o mesmo expoente e, neste caso, adicionam-se as respetivas mantissas.

Exemplos:

$$(1.451 * 10^{0}) + (2.70145 * 10^{-3}) = (1.451 * 10^{0}) + (0.00270145 * 10^{0}) = 1.45370145 * 10^{0}$$

 $(1.00101 * 2^{0}) + (1.1001 * 2^{-4}) = (1.00101 * 2^{0}) + (0.00011001 * 2^{0}) = 1.01000001 * 2^{0}$

A norma IEEE754

- Os fabricantes de computadores têm adotado sistemas que diferem em muitos aspeto (base do sistema, número de dígitos na mantissa e no expoente, regras de arredondamento, etc.)
- Para os mesmos cálculos, diferentes computadores (ou máquinas de calcular) podem produzir resultados que não são exatamente iguais (podem até ser muito diferentes).
- No passado foi feito um esforço de uniformização que culminou com a publicação em 1985, da chamada "norma IEEE 754"para o sistema binário cujas especificidades apresentamos resumidamente.

```
formato simples (32 bits):
    sinal (1 bit), expoente (8 bits), mantissa (23 bits)

formato duplo (64 bits):
    sinal (1 bit), expoente (11 bits), mantissa (52 bits)
```

A norma IEEE 754

Representação normalizada: o primeiro bit da mantissa é igual a 1

$$\pm (1. b_{-1}b_{-2} \dots b_{-52})^* 2^e$$

Exemplo

$$(0.1)_{10} = (0.00011001100110011001100 1100 \dots)_2$$

tem a representação normalizada (com 32 bits)

$$(1.1001100110011001100) * 2^{-4}$$

O bit à esquerda do ponto é o **bit implícito** (perfaz o total de 24 bits na mantissa).

A norma IEEE754 (sobre o **eps**ilon)

No formato duplo, o sucessor do número 1

$$1=(1.0...00)*2^{0}$$

(todos os bits iguais a 0, exceto o bit implícito) é o número que tem a representação

$$(1.0...01) * 2^0 = 1 + 2^{-52}$$

Esta distância do número 1 ao seu sucessor é de grande importância, como veremos mais adiante. É uma das constantes definidas no Matlab

>> eps

ans =

2.2204e-16

>> eps==2^-52

ans =

Percorrendo F

- Se o sucessor de 1 é 1+eps, também o sucessor de 1+eps é 1+2*eps. Afinal, em geral, para obter o sucessor de um número de positivo de ℱadiciona-se uma unidade na última posição da mantissa.
- Será que cada número dista do seu sucessor esta quantidade eps?
- Isso só é verdade para os números com expoente e=0, isto é, números de \mathscr{F} entre 1 e 2. Por exemplo, o successor de

$$2=(1.0...00)*2^{1}$$

(nota: observe-se que todas as potências de 2 têm a mesma mantissa)

$$(1.0 \dots 01) * 2^1 = (1 + eps) * 2 = 2 + 2eps$$

■ A distância entre um número x_- e o seu successor x_+ depende do expoente e de x_- . Se

$$x_{-} = \pm (1. b_{-1} b_{-2} \dots b_{-52})^* 2^e$$

Majoração do erro absoluto de arredondamento

Se

$$x_- < x < x_+$$

resulta da expressão anterior que

$$|x - fl(x)| < 2^{e - 52} \tag{2}$$

- \square 2^{e-52} é o majorante do erro absoluto devido ao arredondamento
- Para números grandes este erro absoluto pode ser proporcionalmente grande;

Exemplo: se x tem expoente e=53, de (2) resulta

$$|x - fl(x)| < 2$$

o que mostra que o erro absoluto pode ser grande (e ainda maior do que isto para expoentes maiores).

[nota: este exemplo também mostra que há muitos números inteiros que não pertencem a [state of também mostra que há muitos números inteiros que não pertencem a [state of também mostra que há muitos números inteiros que há muitos números que há muitos que há muitos números números que há muitos números que há muitos números que há muitos números números que há muitos números n

Majoração do erro relativo de arredondamento para números normais

Com

$$x = \pm (1. b_{-1} b_{-2} ... b_{-52})^* 2^e$$

resulta de (2) que
$$\frac{|x-fl(x)|}{|x|} < \frac{2^{e-52}}{|x|} < 2^{-52}$$
 (por ser $|x| > 2^e$)

Tem-se

$$\frac{|x-fl(x)|}{|x|} < \text{eps} \tag{3}$$

isto é, o erro relativo é majorado por eps, desde que x não seja, em valor absoluto, menor do que 2^{-1022} (Porquê?)

Ao contrário do erro absoluto, o erro relativo não depende da grandeza do número que é arredondado. Por outras palavras, o sistema de ponto flutuante representa números grandes e pequenos com a mesma precisão.

A norma IEEE754 (expoentes)

- No formato simples, os oito bits reservados para o expoente permitem obter ${f 2}^8=256$ números positivos diferentes, desde 0 até 255.
- E para representar expoentes negativos (para números inferiores à unidade, em valor absoluto)?
- Não se usa um bit reservado para o sinal do expoente.
- bias exponent expoente enviesado: para obter o verdadeiro expoente, o hardware subtrai 127.
- As representações 00000000 e 11111111 são usadas para situações especiais, número desnormalizado e overflow, resp.
- □ Formato simples $-126 \le e \text{ (inteiro)} \le 127$
- □ Formato duplo $-1022 \le e (inteiro) \le 1023$

O maior número representável na norma IEEE 754

```
= 2^{1023} + 2^{1022} + ... + 2^{971}
>> realmax
ans =
1.7977e+308
>> x = 0; for k = 971 : 1023; x = x + 2^k; end; x == realmax
ans =
```

Overflow

Uma expressão para calcular realmax

$$m = 1 + 2^{-1} + 2^{-2} + ... + 2^{-51} + 2^{-52}$$

$$2m = 2 + 1 + 2^{-1} + ... + 2^{-51}$$

$$m = 2 - 2^{-52}$$

realmax= $(2-2^{-52})*2^{1023}=2^{1024}-2^{971}$

```
>> 2^1024-2^971==realmax
ans =
0
```

>> 2^1024 ans =

Inf

O realmin

O menor número normalizado é (1.0 ... 0)* 2^{-1022}

```
>> 2^-1022==realmin
```

ans =

1

>> realmin

ans =

2.2251e-308

Underflow gradual

O Matlab representa números cujo valor absoluto é menor do que realmin

```
>> 2^{-1023}/2^{-1024}

ans =2

2^{-1023}=(0.10...00)*2^{-1022}

2^{-1024}=(0.010...00)*2^{-1022}

...

2^{-1074}=(0.000...01)*2^{-1022}

>> 2^{-1075}

ans =
```

Nota: números menores do que realmin são representados com menor precisão (são armazenados menos bits significativos)

Arredondamento para o mais próximo

```
Para o mais próximo ('default' no Matlab)
x=1; x+eps/3 ==x
ans =
>> x=1/2; x+eps/3==x
ans =
 0
>> x=1; x+eps/2==x
ans =
   1
```

Quatro modos de arredondamento

```
Para a direita
>> system_dependent('setround','-Inf')

Para a esquerda
>> system_dependent('setround','Inf')

Na direção de zero (corte)
>> system_dependent('setround','0')

'Default'
>> system_dependent('setround','nearest')
```

Soma com diferentes arredondamentos (1)

```
% esta script calcula o valor da soma de n números gerados
% aleatoriamente entre -1 e 1, usando os quatro modos de
% arredonamento previsto na norma IEEE
x=2*(rand(n,1)-0.5);
% rand(n,1) gera um vetor coluna com n entradas entre 0 e 1
system_dependent('setround',-Inf)
sEsq=sum(x)
% valor da soma calculada com arredondamento para -Inf
system_dependent('setround',0)
sZero=sum(x)
% valor da soma calculada com arredondamento para 0
system_dependent('setround',0.5)
sPro=sum(x)
% valor da soma calculada com arredondamento para o mais próximo
system_dependent('setround',Inf)
sDir=sum(x)
% valor da soma calculada com arredondamento para +Inf
```

Soma com diferentes arredondamentos (2)

```
>> n=1000; format long; quatro_somas
O resultado exato está no intervalo [sEsq, sDir]
>> format long, n=100; quatro_somas
>> sDir-sEsq
ans =
  2.131628207280301e-14
O erro cresce com o número n de parcelas
```

Algarismos significativos

Nas representações seguintes o número π é aproximado com o mesmo número de algarismos significativos (neste caso, com 3 algarismos significativos)

$$3.14 * 10^{0}$$

$$314 * 10^{-2}$$

$$0.00314 * 10^{3}$$

Enfatiza-se que na última representação <u>os zeros à direita do ponto decimal não são algarismos significativos</u>.

□ Na representação normalizada (norma IEEE 754)

$$\pm (1. b_{-1}b_{-2} \dots b_{-52})^* 2^e$$

os números têm todos 53 bits significativos independentemente da sua grandeza (expressa pelo expoente e)

Algarismos significativos corretos

Se

$$\bar{x} = (0.d_{-1}d_{-2}...d_{-t})*10^e, d_{-1}>0$$

(mantissa com t algarismos) então $|x - \bar{x}| < 10^{e-t}$, qualquer que seja o modo de arredondamento. No **arredondamento para o mais próximo**

$$|x - \bar{x}| \le \frac{10^{e-t}}{2}$$

e o majorante para o erro relativo é, por ser $|x| \ge d_{-1}*10^e$,

$$\frac{|x-\bar{x}|}{|x|} \le \frac{1}{2} \frac{10^{e-t}}{10^{e-1}} = \frac{1}{2} 10^{-t+1}$$

Dizemos neste caso que \bar{x} aproxima x com t algarismos significativos corretos

Exemplo no Matlab

$$\pi = 3.1415926535 \dots$$

Com **t** algarismos significativos corretos:

$$\Box$$
 t=3, $\bar{\pi}$ = 3.14

$$\Box$$
 t=4, $\bar{\pi}=3.142$

$$\Box$$
 t=5, $\bar{\pi}$ = 3.1416

O cancelamento subtrativo (1)

Perda de algarismos significativos na subtração de números

Exemplo

Sejam $\bar{x} = 1.43275$ e $\bar{y} = 1.43264$ aproximações de x e y, ambas com seis algarismos corretos.

Neste caso, $\bar{x} - \bar{y} = 0.00011$ representa o valor exato de x - y com apenas dois algarismos corretos

A mesma perda de algarismos ocorre se os números tiverem outros expoentes, por exemplo com

$$\overline{x} = 1.43275*10^7$$

 $\overline{y} = 1.43264*10^7$

е

$$\overline{x} - \overline{y} = 0.00011*10^7$$

Observe-se que \bar{x} e \bar{y} são $O(10^7)$ e $\bar{x} - \bar{y}$ é $O(10^3)$, há perda de 4 algarismos significativos

O cancelamento subtrativo (2)

Exemplo no Matlab $(sin(x)^2 + cos(x)^2 = 1)$

```
>> x=1e-5; 1-cos(x)^2, sin(x)^2
ans =
1.000000082740371e-10
```

ans = 9.99999999666671e-11

Questão: qual destes números tem mais algarismos significativos corretos?

O cancelamento subtrativo (3)

Resposta: é no resultado dado por $sin(x)^2$

Ocorre cancelamento subtrativo na diferença $1-\cos(x)^2$.

ans =

0.99999999900000

ans =

1.000000082740371e-10

O erro relativo no cancelamento subtrativo (1)

1- cos(1e-5)^2 dá 1.00000082740371e-10

e sin(1e-5)^2 dá 9.99999999666671e-11

Tomando sin(1e-5)^2 como valor exato, o erro absoluto em 1- cos(1e-5)^2 é pequeno

>> x=1e-5; abs(1-cos(x)^2-sin(x)^2)

ans = 3.247895369989818e-16

mas o erro relativo é muito maior

> ans/sin(x)^2

ans =

3.247895370098080e-06

O erro relativo no cancelamento subtrativo (2)

```
1- cos(1e-5)^2 dá 1.000000082740371e-10 sin(1e-5)^2 dá 9.99999999666671e-11
```

Tomando sin(1e-5)^2 como valor exato, o erro absoluto em 1- cos(1e-5)^2 é pequeno

ans = 8.277370427339253e-18

mas o erro relativo é muito maior

> ans/sin(x)^2

ans =

8.277370427615165e-08

Propagação do erro relativo

Erros relativos grandes podem gerar erros absolutos também grandes

```
>> x=1e-5; (1-cos(x)^2)/(sin(x)^2)

ans =

1.000000082773704

O resultado exato é 1, o erro absoluto é

>> abs(1-ans)

ans =8.277370433518172e-08
```

Condicionamento de uma função

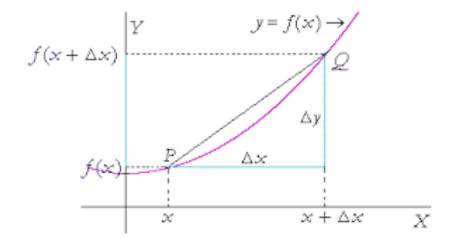
O **número de condição de uma função num ponto** x mede a variação do valor f(x) provocadas por pequenas alterações (perturbações) no valor do argumento x.

Exemplo

```
>> x=10; deltaX=1e-5; exp(x+deltaX)-exp(x)
ans =
0.2203
```

Uma perturbação de $\Delta x = 10^{-5}$ no valor do argumento provocou um erro (absoluto) aproximadamente igual a $2*10^{-1}$, bastante maior.

O número de condição absoluto de uma função num ponto



$$\Delta y = |f(x + \Delta x) - f(x)| \approx |f'(x)|. \ \Delta x$$

|f'(x)| é o número de condição absoluto de f no ponto x

$$f(x + \Delta x) = f(x) + f'(x). \ \Delta x + \frac{f''(x)}{2} (\Delta x)^2 + \dots + \frac{f^{(k)}(x)}{k!} (\Delta x)^k + \dots$$

A soma dos termos que se desprezam é o erro de TRUNCATURA

O número de condição relativo de uma função num ponto

De

$$\Delta y = |f(x + \Delta x) - f(x)| \approx |f'(x)|. \ \Delta x$$

|f'(x)| é o número de condição absoluto de f no ponto x

com $x \neq 0$ e $f(x) \neq 0$, resulta

$$\left|\frac{\Delta y}{y}\right| = \left|\frac{f(x+\Delta x)-f(x)|}{f(x)}\right| \approx \left|\frac{x.f'(x)}{f(x)}\right|.\left|\frac{\Delta x}{x}\right|$$

 $\left|\frac{\Delta y}{y}\right| = \left|\frac{f(x+\Delta x)-f(x)|}{f(x)}\right| \approx \left|\frac{x.f'(x)}{f(x)}\right|.\left|\frac{\Delta x}{x}\right| \left|\frac{x.f'(x)}{f(x)}\right|$ é o número de condição relativo de f no ponto x

Exemplo: $f(x) = e^x$, x = 10, $\Delta x = 10^{-5}$

$$\Delta y \approx |f'(x)|$$
. $\Delta x = e^{10} * 10^{-5} = 0.2203$...

(erro absoluto cresce $e^{10} \approx 22026$ vezes)

$$\left|\frac{\Delta y}{y}\right| \approx |x| \cdot \left|\frac{\Delta x}{x}\right| = \mathbf{10} * 10^{-6}$$

(erro relativo cresce 10 vezes)

Números de condição relativos e perda de algarimos significativos corretos

Se o número de condição relativo é da ordem de grandeza de 10^k , então há perda de kalgarismos decimais no valor da função.

```
Exemplo 1
```

format long, x=1; deltaX=1e-5; x+deltaX, exp(x), exp(x+deltaX)

ans =

1.000010000000000 x+deltaX aproxima x com 5 algarimos corretos

ans =

2.718281828459046 número de condição é |x|=1

ans =

2.718309011413245 $\exp(x+\text{deltaX})$ aproxima $\exp(x)$ com 5 algarimos corretos

Exemplo 2

x=100; deltaX=1e-3; x+deltaX, exp(x), exp(x+deltaX)

ans =

1.000010000000000e+02 x+deltaX aproxima x com 5 algarimos corretos

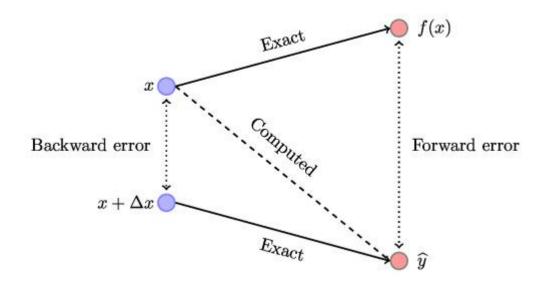
ans =

2.688117141816136e+43 número de condição é |x|=100

ans =

2.690806603464667e+43 $\exp(x+\text{deltaX})$ aproxima $\exp(x)$ com 3 algarimos corretos

Erro direto (forward) e erro inverso (backward)



- O erro direto $|f(x) \hat{y}|$ depende do condicionamento de f no ponto x e dos erros cometidos no cálculo de f(x)
- O erro inverso $|\Delta x|$ não depende do condicionamento de f no ponto x

Instabilidade numérica versus condicionamento

Um algoritmo (ou simplesmente uma expressão numérica) diz-se numericamente instável quando para certos dados produzir erros grandes nas operações efetuadas conduzindo a um resultado com pouca (ou nenhuma precisão).

Não confundir instabilidade numérica do algoritmo com condicionamento da função.

Por exemplo, devemos estar atentos à possibilidade de ocorrência de cancelamento subtrativo e substituir uma expressão numérica por outra que seja matematicamente equivalente e que evite o cancelamento.

Exemplo

```
>> 1/(sqrt(10^12+3)-sqrt(10^12))
ans =
6.666615903764067e+05

>> (sqrt(10^12+3)+sqrt(10^12))/3
ans =
6.6666666666671666e+05
```

multiplicamos numerador e denominador por sqrt(10^12+3)+sqrt(10^12)

Séries de Taylor (1)

Desenvolvimento em série de potências de x de uma função f com derivadas contínuas

$$f(x) = f(0) + f'(0) x + \frac{f''(0)}{2} x^2 + \frac{f'''(0)}{3!} x^3 + \dots + \frac{f^{(k)}(0)}{k!} x^k + \dots$$

Exemplos

$$sin(x) = sin(0) + cos(0) x - \frac{sin(0)}{2} x^2 - \frac{cos(0)}{3!} x^3 + \frac{sin(0)}{4!} x^4 + \frac{cos(0)}{5!} x^5 + \dots$$

$$= x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots$$

$$cos(x) = cos(0) - sin(0) x - \frac{cos(0)}{2} x^2 + \frac{sin(0)}{3!} x^3 + \frac{cos(0)}{4!} x^4 - \frac{sin(0)}{5!} x^5 + \dots$$

$$= 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots$$

$$\exp(x) = \exp(0) + \exp(0) x + \frac{\exp(0)}{2} x^2 + \frac{\exp(0)}{3!} x^3 + \frac{\exp(0)}{4!} x^4 + \frac{\exp(0)}{5!} x^5 + \dots$$
$$= 1 + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \dots$$

Séries de Taylor (2)

Desenvolvimento em <u>série de potências de x-a</u> de uma função f com derivadas contínuas

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2}(x - a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(x - a)^3 + \dots + \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x - a)^k + \dots$$

Exemplo 1 $(f(x) = \sin(x), a = \pi/2)$

$$sin(x) = sin(\pi/2) + cos(\pi/2) (x - \pi/2) - \frac{sin(\pi/2)}{2} (x - \pi/2)^2 - \frac{cos(\pi/2)}{3!} (x - \pi/2)^3 + \frac{sin(\pi/2)}{4!} (x - \pi/2)^4 + \dots$$

$$= 1 - \frac{(x - \pi/2)^2}{2!} + \frac{(x - \pi/2)^4}{4!} - \frac{(x - \pi/2)^6}{6!} \dots$$

Exemplo 2 ($f(x) = \log(x)$, a = 1)

Para o logaritmo natural (de base e) $f(x) = \log(x)$, tem-se $f'(x) = x^{-1}$, $f''(x) = -x^{-2}$, $f'''(x) = 2x^{-3}$, $f^{(iv)}(x) = -3 * 2x^{-4}$, $f^{(v)}(x) = 4 * 3 * 2x^{-5}$,... $f^{(k)}(1) = (-1)^{k+1}(k-1)!$

$$\log(x) = (x-1) - \frac{(x-1)^2}{2} + \frac{(x-1)^3}{3} + \dots + (-1)^{k+1} \frac{(x-1)^k}{k} + \dots \text{ v\'alida para } 0 < x \le 2$$

$$\log(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \dots + (-1)^{k+1} \frac{x^k}{k} + \dots \text{ v\'alida para } -1 < x \le 1$$

Majoração dos erros de truncatura (1)

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2}(x - a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(x - a)^3 + \dots + \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x - a)^k + \frac{R_k(x)}{n}$$
$$= T_k(x) + \frac{R_k(x)}{n}$$

 $T_k(x)$ aproxima o valor de f(x) com erro de truncatura $R_k(x)$.

Resto na forma de Lagrange

$$R_k(x) = \frac{f^{(k+1)}(\theta)}{(k+1)!} (x-a)^{k+1}$$

 θ é um ponto que está entre a e x.

Se $|f^{(k+1)}(\theta)| \le M$, para qualquer θ entre a e x, então

$$|R_k(x)| \le \frac{M}{(k+1)!} |x - a|^{k+1}$$

Majoração dos erros de truncatura (2)

Exemplo

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + R_6$$

com
$$R_6(x) = \frac{f^{(7)}(\theta)}{7!}x^7$$
.

Para
$$x = \frac{\pi}{6}$$
, no Matlab

$$>> x=pi/6; T6=x-x^3/factorial(3)+x^5/factorial(5)$$

$$T6 = 0.500002132588792$$

$$e |R_6\left(\frac{\pi}{6}\right)| \le \frac{1}{7!} \left(\frac{\pi}{6}\right)^7$$

>> (pi/6)^7/factorial(7)

ans =2.140719769235796e-06

Nota: o valor exato é 0.5, o erro é 2.132588792e-06

Majoração dos erros de truncatura (3)

Numa série alternada, o erro de truncatura é inferior ao valor absoluto do primeiro termo que se despreza

II. Resolução de equações não-lineares

Determinar x tal que

$$f(x) = 0$$

(raízes da equação ou zeros de f)

Fórmula resolvente da equação polinomial de segundo grau $ax^2 + bx + c = 0$

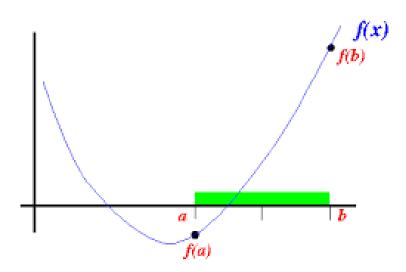
$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

Como calcular as raízes da equação $x^5 - x^4 + 2x^3 - 3x^2 - 5x + 6 = 0$? No Matlab

```
>> roots([1,-1,2,-3,-5,6])
ans =
   -0.0943 + 1.9135i
   -0.0943 - 1.9135i
   -1.1878 + 0.0000i
   1.3763 + 0.0000i
   1.0000 + 0.0000i
```

A importância da continuidade da função f

Se f é contínua [a,b] e f(a). f(b) < 0, então existe pelo menos uma raiz r da equação f(x) = 0 entre a e b.



Método da bissecção

f é contínua [a,b] e f(a). f(b) < 0

<u>Em cada iteração</u>, divide-se em duas partes iguais e escolhe-se o subintervalo em que f muda de sinal:

Calcula-se o valor de f no ponto médio m = (a + b)/2

Se f(m) então $r \leftarrow m$

Se f(m) * f(a) < 0 (a raiz está entre $a \in m$) faz-se $b \leftarrow m$.

Se f(m) * f(a) > 0 (a raiz está entre $m \in b$) faz-se $a \leftarrow m$.

(ver figura 2.2 na p.42 do livro)

Método da bissecção. Exemplo

(ver Exemplo 2.1 do livro) No início de cada ano o cliente de um banco deposita v euros num fundo de investimento e retira ao fim do n-ésimo ano um capital de M euros. Queremos calcular a taxa de juro anual r deste investimento.

Dado que

$$M = v \sum_{k=1}^{n} (1+r)^{k} = v \frac{1+r}{r} [(1+r)^{n} - 1],$$

r é uma raiz da equação f(x) = 0, onde

$$f(x) = M - v \frac{1+x}{x} [(1+x)^n - 1].$$

Consideremos que o investidor deposita anualmente v=1000 e que depois de 5 anos recebe o capital M=6000 euros. Qual a taxa de juro anual que lhe pagou o banco?

>> f=inline('6000-1000*(1+x)/x*((1+x)^5-1)'); fplot(f,[0.01,0.3])₄₇

Método da bissecção. Exemplo (continuação)

Vemos que f tem um zero entre a = 0.01 e b = 0.3.

```
No Matlab,

>> a=0.01; b=0.3; f(a), f(b)

ans = 847.9849

ans = -5.7560e+03

Primeira iteração

>> m=(a+b)/2, f(m)

m =0.1550

ans =-1.8649e+03
```

Porque f(a) e f(m) têm sinais contrários, a raiz está entre a=0.01 e m=0.155. Fazemos b=m e continuamos a iterar com o novo intervalo [a,b]=[0.01,0.155] cuja amplitude é metade da amplitude do intervalo inicial [0.01,0.3]

A convergência do método da bissecção (1)

Ao fim de k iterações, temos o intervalo $[a^{(k)}, b^{(k)}]$ tal que

$$b^{(k)} - a^{(k)} = \frac{b-a}{2^k}$$

O erro na aproximação

$$x^{(k)} = (a^{(k)} + b^{(k)})/2$$

$$e^{(k)} = |x^{(k)} - r| < \frac{b-a}{2^{k+1}}$$

Para garantir que $|e^{(k)}|$ < tol, basta fazer k_{min} iterações onde k_{min} é o menor inteiro positivo que satisfaz a desigualdade

$$k_{min} > \log_2\left(\frac{b-a}{\text{tol}}\right) - 1$$

c.a.:
$$\frac{b-a}{2^{k+1}} < \text{tol} \iff \frac{b-a}{\text{tol}} < 2^{k+1} \iff \log_2\left(\frac{b-a}{\text{tol}}\right) < k+1$$

A convergência do método da bissecção (2)

Voltando ao problema anterior da taxa de juro, com $a=0.01, b=0.3\,$ e tol=1e-4, de

concluímos que k_{min} =14

nota: se efetuarmos 14 iterações obtemos a aproximação

$$x^{(14)} = 0.0614...$$

que corresponde a uma taxa de juro anual de 6,14%

Vantagens e desvantagens do método da bissecção

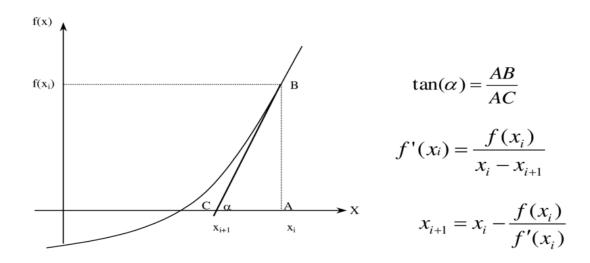
VANTAGENS:

- Convergência garantida
- A função f não precisa de ser derivável (basta que seja contínua)
- Cada iteração requer apenas o cálculo da função num ponto (o ponto médio)
- Excelente estabilidade numérica (erros no cálculo de f não afetam o resultado desde que o sinal do valor calculado esteja correto)

DESVANTAGEM (única):

 Convergência lenta (linear); cada iteração acrescenta apenas mais um bit correto à aproximação

O método de Newton-Raphson (das tangentes)



 $x^{(i+1)}$ é a abcissa do ponto em que a reta tangente à curva no ponto de abcissa $x^{(i)}$ interseta o eixo dos xx

https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/e/e0/NewtonIteration Ani.gif

A evolução do erro de truncatura

Do desenvolvimento em série de Taylor na p. 42, com x = r e $a = x^{(i)}$):

$$f(r) = f(x^{(i)}) + f'(x^{(i)}) (r - x^{(i)}) + \frac{f''(\theta)}{2} (r - x^{(i)})^2$$

e assumindo que $f'(x^{(i)}) \neq 0$, resulta

$$r - x^{(i)} = -\frac{f(x^{(i)})}{f'(x^{(i)})} - \frac{f''(\theta)}{2f'(x^{(i)})} (r - x^{(i)})^2$$

$$r = x^{(i)} - \frac{f(x^{(i)})}{f'(x^{(i)})} - \frac{f''(\theta)}{2f'(x^{(i)})} (r - x^{(i)})^2$$

e

$$r - x^{(i+1)} = -\frac{f''(\theta)}{2f'(x^{(i)})} (r - x^{(i)})^2$$

A convergência quadrática

Resulta

$$r - x^{(i+1)} = -\frac{f''(\theta)}{2f'(x^{(i)})} (r - x^{(i)})^2$$

Conclusão: $x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{f(x^{(i)})}{f'(x^{(i)})}$ aproxima o valor da raiz r com erro de truncatura proporcional ao quadrado do erro da aproximação $x^{(i)}$.

Por exemplo, Se $|r - x^{(i)}| \approx 10^{-3}$ então

$$r - x^{(i+1)} \approx -\frac{f''(\theta)}{2f'(x^{(i)})} (10^{-3})^2$$

e se
$$\left| \frac{f''(\theta)}{2f'(x^{(i)})} \right| \approx 1$$
 então $|r - x^{(i+1)}| \approx 10^{-6}$.

Para a iteração seguinte

$$r - x^{(i+2)} = -\frac{f''(\mu)}{2f'(x^{(i+1)})} (r - x^{(i+1)})^2$$

onde μ está entre r e $x^{(i+1)}$...

Ordem de convergência

Se
$$f'(r) \neq 0$$
,
$$\lim_{i \to +\infty} \frac{r - x^{(i+1)}}{(r - x^{(i)})^2} = -\frac{f''(r)}{2f'(r)}$$

Definição: num método iterativo, se

$$\lim_{i \to +\infty} \frac{|r - x^{(i+1)}|}{|(r - x^{(i)})|^p} = C > 0$$

- **p** para i suficientemente grande, $r x^{(i+1)} \approx C \cdot (r x^{(i)})^p$
- □ p (positivo não necessariamente inteiro) é a ordem de convergência do método
- □ C é a constante de convergência assimptótica
- p = 2 no caso do método de newton-Raphson (convergência quadrática)
- p = 1 no caso do método da bisseção (convergência linear)

Exemplo no Matlab

$$>> df = inline('-1000*(-1/x^2*((1+x)^5-1)+(1+1/x)*5*(1+x)^4)')$$

$$>> x= 0.3$$
; % aproximação inicial

>>
$$x=x-f(x)/df(x) \% 1^a$$
 iteração $x = 0.118642027821101$

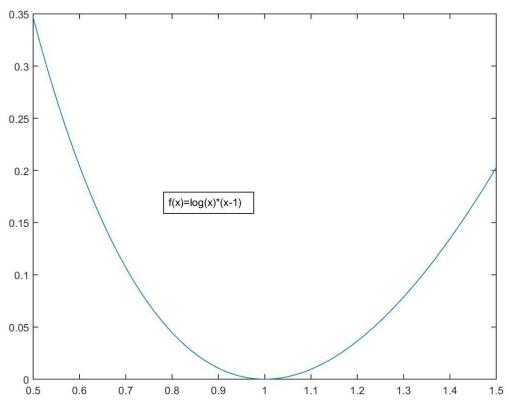
$$>> x=x-f(x)/df(x) \% 5^{\underline{a}}$$
 iteração

x = 0.061402411536525

NOTA: o método da bissecção precisou de 14 iterações para produzir 0.0614...

Quando a raiz não é simples (1)

Se r tem multiplicidade superior a 1, é f'(r) = 0 (à medida que $x^{(i)}$ se aproxima da raiz, a reta tangente tende para o eixo dos xx). A convergência é apenas linear (ver figura 2.4 do livro)



Um exemplo de aplicação

Nos primeiros modelos de computadores digitais a divisão $\,$ não era efetuada por hardware mas sim por software. Assim, a divisão de a por b, implicava a multiplicação de a pelo $\,$ inverso de $\,$ b.

O inverso aritmético de um número b $\neq 0$ é a raiz da equação b $-\frac{1}{x} = 0$.

A fórmula iterativa $x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{f(x^{(i)})}{f'(x^{(i)})}$

dá

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{b - \frac{1}{x^{(i)}}}{\frac{1}{(x^{(i)})^2}} = x^{(i)} - (b(x^{(i)})^2 - x^{(i)})$$

ou seja $x^{(i+1)}=x^{(i)} (2-bx^{(i)})$

Para calcular o valor de 1/7 (sem usar divisão), podemos começar com $x^{(0)}$ =0.1 e usar a fórmula anterior para calcular $x^{(1)}, x^{(2)},...$

O método de Newton nem sempre converge

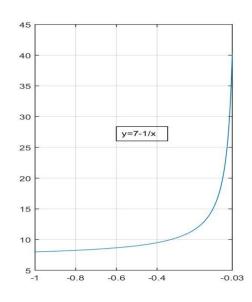
No exemplo anterior, começando com $x^{(0)}$ =0.3, o método diverge.

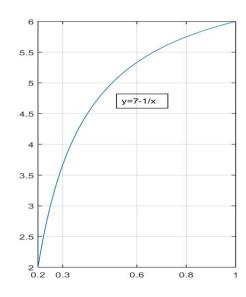
A tangente à curva no ponto de abcissa 0.3 interseta o eixo dos xx no ponto de abcissa -0.03

$$>> b=7; x=0.3;$$

$$>> x = x^*(2-b^*x)$$

x = -0.030000000000000





Critérios de paragem

$$x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)}, \dots x^{(i)}, \dots \to r$$
 parar quando $|e^{(i)}| = |x^{(i)} - r| < tol$?

Fixada uma tolerância tol:

- $|x^{(i)} x^{(i-1)}| < tol$ (teste sobre o incremento)
- $|f(x^{(i)})| < tol$ (teste sobre o resíduo)

O erro $|x^{(i)} - r|$ e o resíduo podem ser muito diferentes (ver figura 2.5, p.59 do livro)

O método do ponto fixo (1)

No Matlab, partindo de um qualquer valor real x, e repetindo o comando

$$>> x = cos(x)$$

a sucessão de valores converge (embora lentamente) para 0.739085133215161

Este número diz-se um **ponto fixo** da função coseno. É uma raiz da equação $x - \cos(x) = 0$.

Em geral, um ponto fixo de uma função φ é uma raiz da equação

$$x = \varphi(x)$$

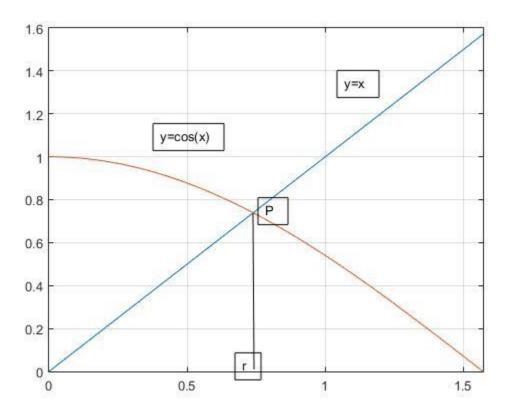
ou

$$f(x) = 0$$

$$\operatorname{com} f(x) = x - \varphi(x).$$

O método do ponto fixo (2)

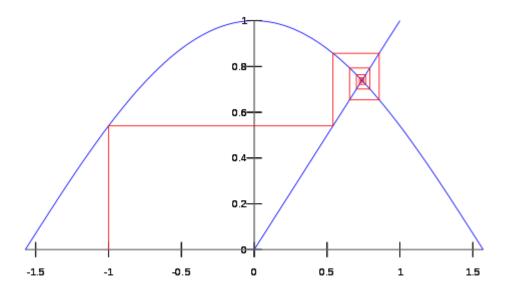
O ponto fixo de cos(x) é a abcissa do ponto P em que a curva da função coseno interseta a reta y=x.



Interpretação geométrica das iterações do ponto fixo

O ponto fixo de cos(x) é a abcissa do ponto P em que a curva da função coseno interseta a reta y=x.

 $x^{(0)}$ =-1 aproximação inicial, $x^{(1)}$ = $\cos(-1)$ = 0.54 ..., $x^{(2)}$ = $\cos(0.54$...) = 0.85 ...



Análise da convergência do método do ponto fixo (1)

$$x = \varphi(x)$$

A partir da aproximação inicial $x^{(0)}$, $x^{(1)} = \varphi(x^{(0)})$, $x^{(2)} = \varphi(x^{(1)})$, ... $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$

Que condições devem satisfazer a função iteradora φ e o valor inicial $x^{(0)}$ para que a sucessão seja convergente para o ponto fixo?

Teorema do valor médio de Lagrange: se φ tem derivada contínua em [a,b], então existe pelo menos um ponto θ entre a e b tal que

$$\varphi'(\theta) = \frac{\varphi(b) - \varphi(a)}{b - a}$$

Interpretação intuitiva: se $\varphi(b) - \varphi(a)$ representar a distância percorrida desde o instante a até ao instante b, então $\frac{\varphi(b)-\varphi(a)}{b-a}$ é a velocidade média nesse intervalo de tempo. O valor $\varphi'(\theta)$ é a velocidade (instantânea) no instante θ . Em pelo menos um instante, a velocidade é igual à velocidade média.

Análise da convergência do método do ponto fixo (2)

Aplicando o teorema do valor médio à **função iteradora** φ no intervalo $[x^{(k)}, r]$: existe θ entre $x^{(k)}$ e r tal que

$$\varphi'(\theta) = \frac{\varphi(x^{(k)}) - \varphi(r)}{x^{(k)} - r}$$

resulta

$$\varphi(x^{(k)}) - \varphi(r) = \varphi'(\theta)(x^{(k)} - r).$$

Uma vez que $\varphi(x^{(k)})=x^{(k+1)}$ e $\varphi(r)=r$:

$$x^{(k+1)} - r = \varphi'(\theta)(x^{(k)} - r)$$

O erro na iteração k+1 é igual ao erro na iteração anterior multiplicado por $\varphi'(\theta)$. Se $|\varphi'(\theta)| < 1$ então $|x^{(k+1)} - r| < |x^{(k)} - r|$.

Se existir $M \in]0,1[$ tal que $|\varphi'(x)| < M$ num intervalo I centrado em r e $x^{(0)} \in I$, então o método converge porque

$$|x^{(k)} - r| < M^k(x^{(0)} - r)$$
 e $M^k \to 0$

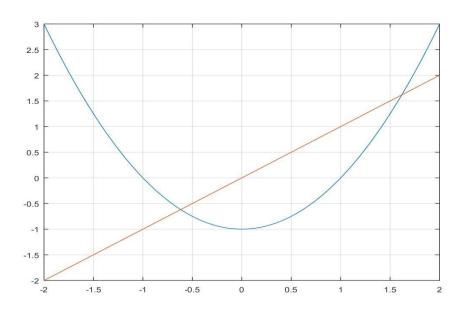
Análise da convergência do método do ponto fixo (3)

Exemplo 1: a função $\varphi(x) = \cos(x)$ satisfaz a condição requerida:

$$\varphi'(r) = \sin(r) = \sin(0.7391...) \approx 0.67$$

Em qualquer intervalo I = [r - a, r + a] que não contenha $\pi/2$ tem-se $|\varphi'(x)| < M < 1$ e a convergência está garantida com $x^{(0)} \in I$.

Exemplo 2: $\varphi(x) = x^2 - 1$ tem dois pontos fixos $r_{\pm} = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2}$ mas $|\varphi'(r_{\pm})| = |1 \pm \sqrt{5}| > 1$. Não há convergência.



A escolha da função iteradora

(1)

Dada a equação f(x) = 0 há infinitas maneiras de a reescrever na forma $x = \varphi(x)$, por exemplo x = x + f(x). As boas escolhas são aquelas que cumprem a condição de ser $|\varphi'(x)|$ próximo de zero numa vizinhança da raiz da equação.

Exemplo Com $x \ne 0$, a equação $\frac{1}{x} - e^x = 0$ pode escrever-se na forma

i.
$$x = e^{-x}$$
, $\varphi_1(x) = e^{-x} \Rightarrow {\varphi'}_1(x) = -e^{-x}$

ii.
$$x = -\log(x), \quad \varphi_2(x) = -\log(x) \Rightarrow {\varphi'}_2(x) = -\frac{1}{x}$$

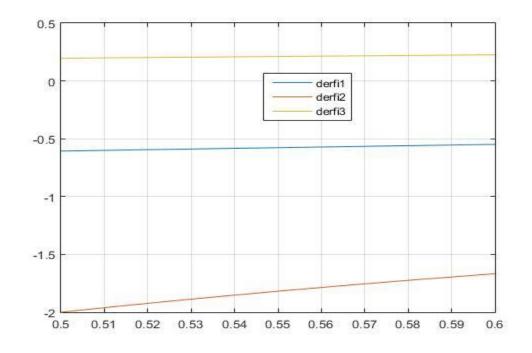
iii.
$$x = \frac{x + e^{-x}}{2}$$
, $\varphi_3(x) = \frac{x + e^{-x}}{2}$, $\Rightarrow {\varphi'}_3(x) = \frac{1 - e^{-x}}{2}$

Começando por observar que a raiz da equação está entre 0.5 e 0.6, no Matlab produzimos os gráficos de ${\phi'}_1$, ${\phi'}_2$ e ${\phi'}_3$ no intervalo [0.5,0.6]:

- >> fplot('[-exp(-x), -1/x, (1-exp(-x))/2]', [0.5, 0.6])
- >> grid on, legend('derfi1','derfi2','derfi3')

A escolha da função iteradora

(2)



Conclusões:

- As funções iteradoras φ_1 e φ_3 produzem sucessões convergentes desde que $0.5 < x^{(0)} < 0.6$ porque neste intervalo é $|\varphi'_1(x)| < 1$ e é $|\varphi'_3(x)| < 1$;
- □ A sequência produzida com φ_2 diverge porque $|\varphi'_2(x)| > 1$

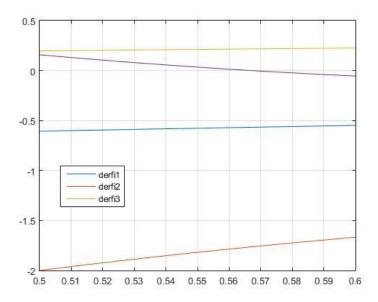
Uma escolha especial da função iteradora

No método de Newton-Raphson, a equação f(x) = 0 é reescrita na forma

$$x = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$
 ou seja $x = \varphi(x)$, com $\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$.

Tem-se
$$\varphi'(x)=1-\frac{(f'(x))^2-f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}=\frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}$$
 e $\varphi'(r)=0$.

Na figura anterior, vamos sobrepor o gráfico de $\varphi'(x)$ para esta escolha de φ :



>> hold on, fplot(' $(1/x-\exp(x))*(2/x^3-\exp(x))/(-1/x^2-\exp(x))^2$ ', [0.5,0.6])

Estimativa do erro $|x^{(k+1)} - r|$ (1)

Se pararmos a as iterações quando $|x^{(k+1)} - x^{(k)}| < \text{tol}$, podemos garantir $|r - x^{(k)}| < tol$? Em geral, não. Tal depende dos valores de $|\varphi'(x)|$ na vizinhança da raiz r.

$$r - x^{(k)} = (r - x^{(k+1)}) + (x^{(k+1)} - x^{(k)})$$

e, uma vez que

$$r - x^{(k+1)} = \varphi'(\theta)(r - x^{(k)})$$

resulta

$$r - x^{(k)} = \varphi'(\theta)(r - x^{(k)}) + (x^{(k+1)} - x^{(k)})$$

ou seja

$$r - x^{(k)} = \frac{1}{1 - \varphi'(\theta)} (x^{(k+1)} - x^{(k)})$$

Se $\varphi'(x) \approx 0$ numa vizinhança de r, então a diferença entre duas iteradas sucessivas dá uma boa estimativa do erro.

$$-1 < \varphi'(x) < 0 \Rightarrow |r - x^{(k)}| < |x^{(k+1)} - x^{(k)}|$$

Estimativa do erro $|x^{(k+1)} - r|$ (2)

Exemplo: a equação $(x-1)^3=0$ tem a raiz r=1 e a fórmula iterativa $x^{(i+1)}=x^{(i)}-\frac{f(x^{(i)})}{f'(x^{(i)})}$ com $f(x)=(x-1)^3$ dá

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{x^{(i)} - 1}{3}$$

Tem-se

$$x^{(i+1)} - r = \frac{2}{3}(x^{(i)} - r)$$
 e a convergência é linear.

A função iteradora é $\varphi(x)=x-\frac{x-1}{3}$ e a derivada é $\varphi'(x)=\frac{2}{3}$ (constante) Resulta

$$r - x^{(k)} = \frac{1}{1 - \frac{2}{3}} (x^{(k+1)} - x^{(k)}) = 3 (x^{(k+1)} - x^{(k)})$$

(1)

No Matlab vamos calcular os coeficientes do polinómio mónico que tem os zeros 1, 1.999, 2 e 2.001.

```
>> p=poly([1, 1.999, 2, 2.001])
p =
1.0000 -7.0000 18.0000 -20.0000 8.0000,
```

Trata-se do polinómio $p(x) \approx x^4 - 7x^3 + 18x^2 - 20x + 8$

Vamos introduzir uma perturbação igual a 10^{-4} num dos coeficientes, por exemplo, vamos considerar o polinómio perturbado $\tilde{p}(x) \approx 1.0001x^4 - 7x^3 + 18x^2 - 20x + 8$.

Qual será o efeito desta perturbação sobre os valores dos zeros 1, 1.999, 2 e 2.001 ? Da ordem de grandeza da perturbação 10^{-4} ou maior?

```
>> p(1)=p(1)+1e-4; r=roots(p)
r =
2.0559 + 0.1052i
2.0559 - 0.1052i
1.8873 + 0.0000i
1.0001 + 0.0000i
```

(2)

O erro é maior do que a perturbação 10^{-4} no caso dos zeros 1.999, 2 e 2.001 mas não no caso do zero igual a 1:

```
>> err=abs(r-[2.001; 2; 1.999; 1])
err =
0.1187
0.1192
0.1117
0.0001
```

Como se explica isto? Pode mostrar-se que o número de condição (absoluto) de uma raiz r da equação f(x) = 0 é igual a $\frac{1}{|f'(r)|}$.

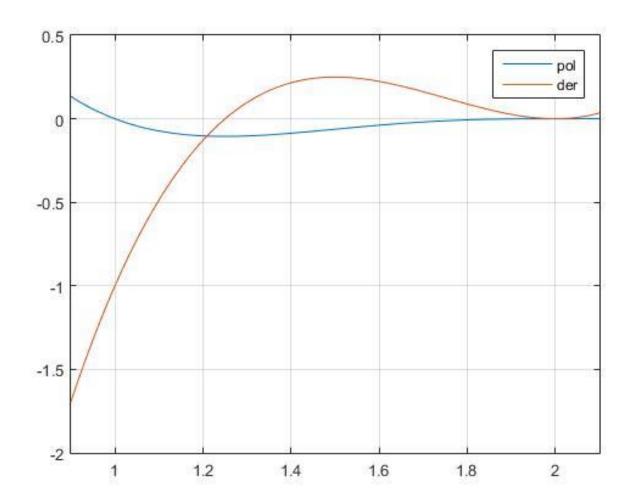
$$p(x) = x^4 - 7x^3 + 18x^2 - 20x + 8$$
$$p'(x) = 4x^3 - 21x^2 + 36x - 20$$

Tem-se p'(2.001) = 3.004e - 6 e o erro 0.1187 é "apenas" 3 ordens de grandeza maior do que 10^{-4} , isto é, não é tão grande quanto $\frac{10^{-4}}{3*10^{-6}}$.

O zero igual a 1 é bem condicionado porque p'(1) = -1.

(3)

Quanto menor for |f'(r)| pior é o condicionamento da raiz r da equação f(x)=0.



-672

-512

No Matlab vamos calcular os coeficientes do polinómio mónico que tem o zero 2 com multiplicidade 9, isto é, $p(x) = (x - 2)^9$.

-4032

2016

```
>> p=poly([2 2 2 2 2 2 2 2 2])
p =
          -18
                   144
>> roots(p)
ans =
 2.0689 + 0.0000i
 2.0518 + 0.0449i
 2.0518 - 0.0449i
 2.0100 + 0.0668i
 2.0100 - 0.0668i
 1.9655 + 0.0566i
 1.9655 - 0.0566i
 1.9383 + 0.0218i
 1.9383 - 0.0218i,
```

Se r é raiz múltipla da equação f(x) = 0 então f'(r) = 0e a raiz é mal condicionada. O condicionamento é pior para multiplicidades maiores

-4608

2304

5376