Unidade de Matemática e Tecnologia - RC/UFG

Modelagem Computacional

Aula 1[2]

Prof. Thiago Alves de Queiroz

[2][Cap. 1] BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. Numerical Analysis (9th ed). Cengage Learning, 2010.

Contínuo e Discreto

- Um sistema discreto possui um número contável de estados. As variáveis do sistema possuem domínio discreto (por exemplo, inteiros);
- Em sistemas discretos, as mudanças ocorrem em tempos particulares e permanecem nesse estado por um período (exemplo: modelos por grafos);
- Um exemplo pode ser o número de clientes em um banco: este número é discreto e somente muda quando alguém entra ou sai;
- Um sistema contínuo possui um número infinito de estados. As variáveis nesse sistema possuem domínio real;
- Em sistemas contínuos, as mudanças ocorrem continuamente sobre o tempo (exemplo: equações diferenciais). Um exemplo é a quantidade de líquido em um tanque;
- O computador pode ser visto como um sistema discreto. Eles são usados para representar sistemas reais (geralmente contínuos) como sistemas discretos.

Limite e Continuidade

- **Definição.** Uma função f definida sobre um conjunto X de números reais tem *limite* L em x_0:

$$\lim_{x \to x_0} f(x) = L \tag{1}$$

se para um dado $\epsilon > 0$ existe um $\delta > 0$ tal que $|f(x) - L| < \epsilon$ para qualquer $x \in X$ e $0 < |x - x_0| < \delta$.

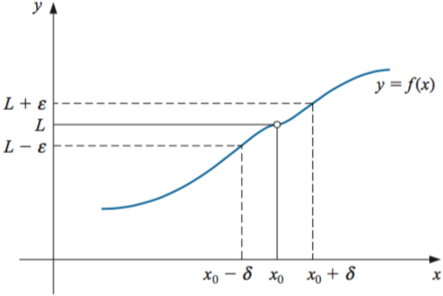


Figura: Ideia de limite de $f(x)$.

- **Definição.** Uma função f é contínua em x_0 se:

$$\lim_{x \to x_0} f(x) = f(x_0). \tag{2}$$

A função é contínua em todo conjunto X se ela for contínua em cada elemento desse conjunto.

- **Definição.** A sequência infinita $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ tem limite x (converge para x) se para algum $\epsilon > 0$ existe um inteiro positivo N tal que $|x_n - x| < \epsilon$ qualquer que seja $n > N$. Assim:

$$\lim_{n \to \infty} x_n = x. \tag{3}$$

- As funções a serem consideradas ao trabalhar com métodos numéricos serão assumidas como contínuas.

Diferenciabilidade

- **Definição.** Uma função f é diferenciável em x_0 se existe

$$f'(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}. \tag{4}$$

- O número $f'(x_0)$ é a derivada de f em x_0. Se a função tem derivada em cada número de X, então ela é diferenciável neste conjunto.

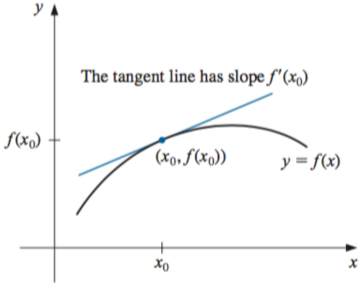


Figura: É a inclinação da reta tangente no ponto $(x_0, f(x_0))$.

Diferenciabilidade

- **Teorema de Rolle.** Seja f contínua em $[a, b]$ e diferenciável em (a, b). Se $f(a) = f(b)$, então existe um número $c \in (a, b)$ com $f'(c) = 0$.

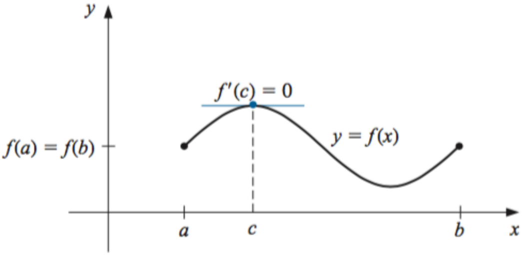


Figura: Exemplo do teorema de Rolle.

Diferenciabilidade

- **Teorema do Valor Médio.** Seja f contínua em $[a, b]$ e diferenciável em (a, b), então existe um número $c \in (a, b)$ com

$$f'(c) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}. \tag{5}$$

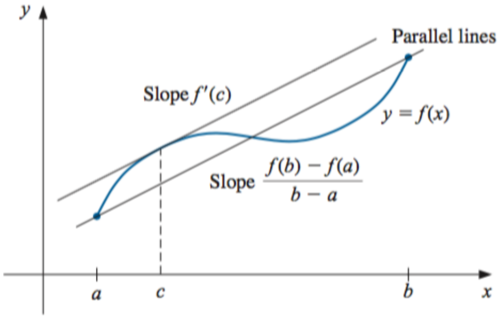


Figura: A tangente ao gráfico de f no ponto c é paralela à secante que passa pelos pontos a e b.

Diferenciabilidade

- **Teorema do Valor Extremo.** Seja f contínua em $[a, b]$, então existem $c_1, c_2 \in [a, b]$ com $f(c_1) \leq f(x) \leq f(c_2)$ para todo $x \in [a, b]$. Além disso, se f é diferenciável em (a, b), então c_1 e c_2 ocorrem nos extremos de $[a, b]$ ou quando f' é zero.

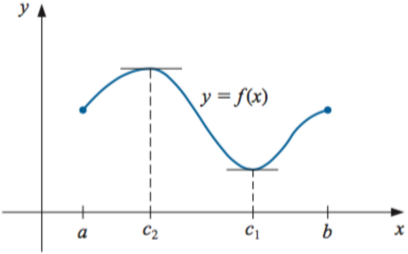


Figura: Exemplo do teorema de valor extremo.

- **Teorema do Valor Intermediário.** Seja f contínua em $[a, b]$ e K qualquer número entre $f(a)$ e $f(b)$, então existe um número $c \in (a, b)$ para o qual $f(c) = K$.

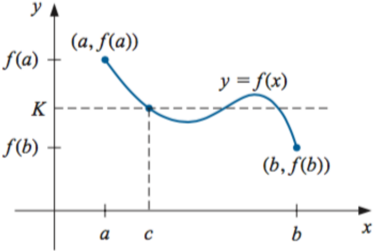


Figura: Há três valores para c que resultam em $f(c) = K$.

Exemplo

- **Exemplo.** Mostre que $x^5 - 2x^3 + 3x^2 - 1 = 0$ tem solução no intervalo $[0, 1]$.
- **Resposta.** Note que a função $f(x) = x^5 - 2x^3 + 3x^2 - 1$ é contínua em $[0, 1]$. Além disso:
  $f(0) = -1 < 0$ e $f(1) = 1 > 0$
- O teorema do valor intermediário então implica que existe um número x satisfazendo $0 < x < 1$ tal que $f(x) = 0$.

Integração

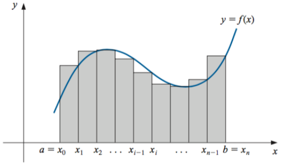
- **Definição.** A integral de Riemann da função f sobre o intervalo $[a, b]$ é o limite de, caso ele exista:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{max\delta x_i \to 0} \sum_{i=1}^{n} f(z_i)\delta x_i. \tag{6}$$

em que: $a = x_0 \leq x_1 \leq \ldots \leq x_n = b$; $\delta x_i = x_i - x_{i-1}$ para cada $i = 1, 2, \ldots, n$; e $z_i \in [x_{i-1}, x_i]$.

- Quando f é contínua em $[a, b]$, ela também é integrável em $[a, b]$:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{n \to \infty} \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^{n} f(x_i). \tag{7}$$



Polinômio de Taylor

- **Teorema de Taylor.** Seja f e suas derivadas contínuas em $[a, b]$, $f^{(n+1)}$ existe sobre $[a, b]$ e $x_0 \in [a, b]$. Para cada $x \in [a, b]$ existe um número $\xi(x)$ entre x_0 e x com:

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x). \tag{8}$$

- $P_n(x)$ é o n-ésimo Polinômio de Taylor para f ao redor de x_0:

$$P_n(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n. \tag{9}$$

- $R_n(x)$ representa o erro de truncamento associado à $P_n(x)$:

$$R_n(x) = \frac{f^{n+1}(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}. \tag{10}$$

- A série infinita obtida ao calcular o limite de $P_n(x)$ quando $n \to \infty$ é chamada de Série de Taylor para f ao redor de x_0.

Exemplo

- **Exemplo.** Seja $f(x) = \cos(x)$ e $x_0 = 0$. Determine a Polinômio de Taylor de ordem 2.
- **Resposta.** Como f e suas derivadas são contínuas em $\mathbb{R}$ (conjunto dos reais), então o Teorema de Taylor pode ser aplicado para qualquer $n \geq 0$. As derivadas são:
  $f'(x) = -\sin(x)$; $f''(x) = -\cos(x)$; $f'''(x) = \sin(x)$.
- Ao substituir $x_0 = 0$, tem-se:
  $f(0) = 1$; $f'(0) = 0$; $f''(0) = -1$ e $f'''(0) = 0$.
- Logo para $f(x) = P_n(x) + R_n(x)$, tem-se:
  $\cos(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \frac{f'''(\xi(x))}{3!}x^3 =$
  $= 1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 \sin(\xi(x))$.
- $\xi(x)$ é algum número (geralmente desconhecido) entre 0 e x.

Exemplo

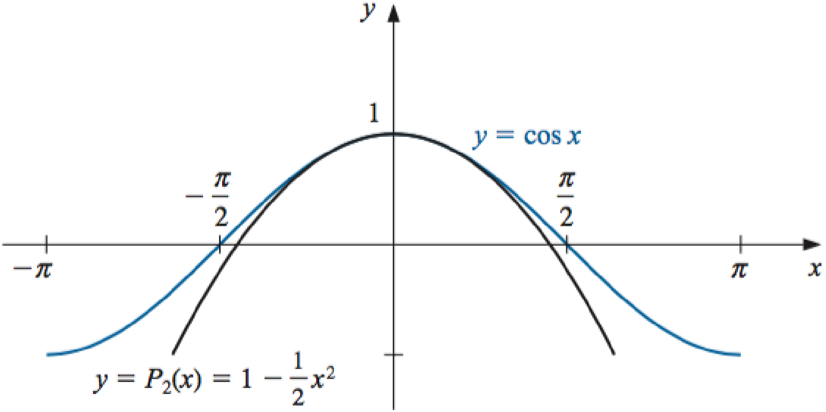


Figura: Aproximação de $\cos(x)$ por $P_2(x)$.

Erros de Arredondamento

- A aritmética feita pelo computador é diferente daquela em cursos de cálculo ou álgebra;
- No computador não é tão simples obter $(\sqrt{3})^2 = 3$, pois a aritmética é finita;
- Na computação cada número é representado por um número fixo e finito de dígitos;
- Por isso, a representação de $\sqrt{3}$ pode não ser precisa, originando o chamado *erro de truncamento*;
- Este erro surge pela uso de um número finito de dígitos para representar números reais.

Números de Máquina Binários

- Os computadores apresentam *hardware* para lidar com números que segue o padrão IEEE 754-2008;
- A representação de um número real é feita usando 64 bits;
- O primeiro bit indica o sinal s;
- Os seguintes 11 bits são usados para representar o expoente c;
- Os restantes 52 bits são usados para representar a fração binária f;
- Assim, o número é da forma: $(-1)^s 2^{c-1023}(1+f)$.

Exemplo

- **Exemplo.** Identifique o número representado por:
0 10000000011
1011100100010000000000000000000000000000000000000000
- **Resposta.** Note que $s = 0$, então o sinal positivo;
- Os próximos 11 bits representam:
$c = 1\times 2^{10}+0\times 2^{9}+\cdots+0\times 2^{2}+1\times 2^{1}+1\times 2^{0} = 1024+2+1 = 1027.$
- Assim, o expoente do número é $2^{c-1023} = 2^{1027-1023} = 2^4$.
- Os restantes 52 bits resultam na fração:
$f = 1\times(\frac{1}{2})^1+0\times(\frac{1}{2})^2+\cdots+1\times(\frac{1}{2})^{12}+0\times(\frac{1}{2})^{13}+\cdots+0\times(\frac{1}{2})^{52}$
- O número decimal representado pela máquina é:
$(-1)^s 2^{c-1023}(1+f) =$
$(-1)^0\times 2^4\times(1+(\frac{1}{2}+\frac{1}{8}+\frac{1}{16}+\frac{1}{32}+\frac{1}{256}+\frac{1}{4096})) = 27,56640625$

Números de Máquina Binários

- O menor número positivo pode ser representado por $s = 0$, $c = 1$ e $f = 0$:
  $m = 2^{-1022}(1 + 0) \approx 0,22251 \times 10^{-307}$.
- Qualquer número com magnitude menor do que m são arredondados para zero (*underflow*);
- O maior número positivo é representado por $s = 0$, $c = 2046$ e $f = 1 - 2^{-52}$:
  $M = 2^{1023}(2 + 2^{-52}) \approx 0,17977 \times 10^{309}$.
- Qualquer número com magnitude maior do que M fazem a computação finalizar (*overflow*);
- Note que é possível representar o número zero de duas formas: positivo ($s = 0$) e negativo ($s = 1$).

Números de Máquina Decimais

- É possível usar uma notação de ponto-flutuante decimal ao invés da binária:
  $\pm 0, d_1 d_2 \ldots d_k \times 10^n$, com $1 \leq d_1 \leq 9$ e $0 \leq d_i \leq 9$ para $i = 2, 3, \ldots, k$.
- Qualquer número real pode ser escrito na forma:
  $y = 0, d_1 d_2 \ldots d_k d_{k+1} d_{k+2} \ldots \times 10^n$.
- Há duas formas para terminar um número real y, resultando na forma de ponto-flutuante $fl(y)$.
- A primeira é *ignorar* os dígitos $d_{k+1} d_{k+2} \ldots$, resultando em:
  $fl(y) = 0, d_1 d_2 \ldots d_k \times 10^n$.
- A outra forma é *arredondar* a partir de algum dígito d_{k+1}, adicionando $5 \times 10^{n-(k+1)}$ e ignorando o restante dos dígitos.

Números de Máquina Decimais

- Para arredondar quando $d_{k+1} \geq 5$, adiciona-se 1 ao dígito d_k para obter $fl(y)$ (arredondar para cima);
- Quando $d_{k+1} < 5$, ignora-se os dígitos a partir do d_{k+1} inclusive (arredondar para baixo);
- **Exemplo.** Seja $\pi = 3,14159265\ldots$. Determine os cinco dígitos decimais a partir dos métodos anteriores.
- **Resposta.** Na forma decimal tem-se $\pi = 0,314159265\ldots \times 10^1$.
- Usando o método de ignorar após a quinta casa decimal, tem-se: $fl(\pi) = 0,31415 \times 10^1$.
- Usando método de arredondar (observando a sexta casa decimal que é o 9), tem-se: $fl(\pi) = (0,31415 + 0,00001) \times 10^1 = 0,31416 \times 10^1$.

Erros por Aproximação

- **Definição.** Seja $p*$ uma aproximação de p. O *erro absoluto* é:

$$|p - p*| \tag{11}$$

E o *erro relativo*, para $p \neq 0$, é:

$$\frac{|p - p*|}{|p|} \tag{12}$$

- **Exemplo.** Determine os erros para $p = 0,3000 \times 10^1$ e $p* = 0,3100 \times 10^1$.
- **Reposta.** O erro absoluto é $0,1$, enquanto o erro relativo é $0,3333 \times 10^1$.
- É importante destacar que o *erro relativo* é mais significativo como medida de precisão.

Erros por Aproximação

- **Definição.** Diz-se que o número $p*$ aproxima p em t dígitos significativos, se t é o maior inteiro não-negativo que:

$$\frac{|p - p*|}{|p|} \leq 5 \times 10^{-t} \tag{13}$$

- **Exemplo.** Determine para quatro dígitos significativos e $p = 100$ uma aproximação que resulta no $\max(|p - p*|)$.
- **Reposta.** Basta jogar na eq. (13) e resolvê-la, ou seja: $\frac{|100 - p*|}{|100|} \leq 5 \times 10^{-4}$, que resulta em $|p - p*| \leq 0,05$.
- Logo, o máximo ocorre para $|p - p*| = 0,05$.

Aritmética Aninhada

- Perda de precisão devido aos erros de arredondamento podem ser reduzidas ao rearranjar as operações.
- **Exemplo.** Avalie $f(x) = x^3 - 6,1x^2 + 3,2x + 1,5$ para $x = 4,71$ e usando três dígitos.
- **Reposta.** $3,2x = 3,2(4,71) = 15,072$ que arredondado torna-se $15,1$;
- $x^2 = (4,71)^2 = 22,1841$ que arredondado torna-se $22,2$;
- $6,1x^2 = 6,1(22,2) = 135,42$ que arredondado torna-se 135;
- $x^3 = x^2(x) = 22,2(4,71) = 104,562$ que arredondado torna-se 105;
- A avaliação com arredondamento é: $f(4,71) = 105 - 135 + 15,1 + 1,5 = -13,4$.

Aritmética Aninhada

- A avaliação exata é: $f(4,71) = 104,487111 - 135,32301 + 15,072 + 1,5 = -14,263899$.
- O erro relativo é: $\frac{|-14{,}263899+13{,}4|}{|-14{,}263899|} \approx 0,06$.
- **Exemplo.** Agora avalie a seguinte escrita *aninhada*, em $x = 4,71$ e usando três dígitos, para $f(x) = ((x - 6,1)x + 3,2)x + 1,5$.
- **Reposta.** $f(4,71) = ((4,71 - 6,1)4,71 - 3,2)4,71 + 1,5 = -14,3$.
- O erro relativo é: $\frac{|-14{,}263899+14{,}3|}{|-14{,}263899|} \approx 0,0025$.
- Realizar o aninhamento da expressão permitiu reduzir o erro relativo significativamente, em torno de 95%;
- Sempre procure diminuir o número de operações (computações) nas expressões.

Algoritmos

- **Definição.** Um *algoritmo* é um procedimento que descreve, de uma maneira sem ambiguidades, uma sequência finita de passos para executar uma determinada tarefa;
- Será utilizado um *pseudocódigo* para descrever os algoritmos, o qual especifica a forma da entrada e a forma da saída;
- Para terminar uma passo (*step*), usa-se o ponto final;
- Parar terminar uma tarefa dentro de um passo, usa-se o ponto-e-vírgula;
- Laços podem ser controlados por contadores: For $i = 1, 2, \ldots, n$;
- Ou por condições internas, como: While $i < N$ do Steps 3-6.

Algoritmos

- Condições são expressas por: If .. then;
- Ou da seguinte forma: If ... then ... else ...;
- Os passos nos algoritmos seguem as regras de programas estruturados;
- Comentários nos algoritmos aparecem dentro de parênteses com texto em itálico;

INPUT $N, x_1, x_2, \ldots, x_n$.

OUTPUT $SUM = \sum_{i=1}^{N} x_i$.

Step 1 Set $SUM = 0$. (*Initialize accumulator.*)

Step 2 For $i = 1, 2, \ldots, N$ do
    set $SUM = SUM + x_i$. (*Add the next term.*)

Step 3 OUTPUT (SUM);
    STOP.

Figura: Algoritmo para calcular $x_1 + x_2 + \cdots + x_N$.

Caracterizando Algoritmos

- **Definição.** Seja E_0 o erro introduzido em algum estágio do algoritmo e E_n representa a magnitude do erro após n subsequente operações:
  - Se $E_n \approx CnE_0$, em que C é uma constante independente de n, então o crescimento do erro é dito *linear*;
  - Se $E_n \approx C^n E_0$, para algum $C > 1$, então o crescimento do erro é dito *exponencial*.
- Crescimento linear do erro nem sempre é possível, todavia o crescimento exponencial deve ser evitado;
- Um algoritmo com crescimento linear do erro é chamado de *estável*, pois pequenas mudanças na entrada ocasiona pequenas mudanças na saída.

Caracterizando Algoritmos

- Um algoritmo com crescimento exponencial do erro é chamado de *instável*;
- Um algoritmo estável apenas para certos dados de entrada são chamados de *condicionalmente estável*.

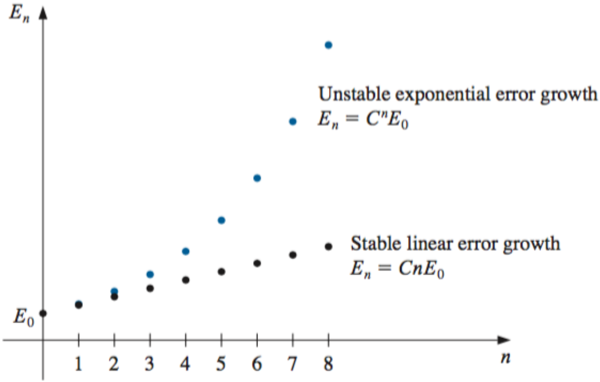


Figura: Diferenças entre crescimento linear e exponencial do erro.

Taxas de Convergência

- Em geral, deseja-se que o algoritmo convirja tão logo quanto possível;
- **Definição.** Suponha que $\{\beta_n\}_{n=1}^{\infty}$ é uma sequência que converge para zero, e $\{\alpha_n\}_{n=1}^{\infty}$ converge para um número α. Se existe uma constante positiva K, tal que para n suficientemente grande:

$$|\alpha_n - \alpha| \leq K|\beta_n|, \tag{14}$$

então $\{\alpha_n\}_{n=1}^{\infty}$ converge para α com *taxa, ou ordem, de convergência* $O(\beta_n)$. Assim, $\alpha_n = \alpha + O(\beta_n)$.
- É comum usar $\beta_n = \frac{1}{n^p}$, tal que se deseja o maior $p > 0$ com $\alpha_n = \alpha + O(\frac{1}{n^p})$.

Taxas de Convergência

- **Exemplo.** Determine a taxa de convergência das sequências abaixo, sabendo que ambas tendem a zero quando $n \to \infty$: $\alpha_n = \frac{n+1}{n^2}$ e $\hat{\alpha}_n = \frac{n+3}{n^3}$
- **Reposta.** Defina as sequências $\beta_n = \frac{1}{n}$ e $\hat{\beta}_n = \frac{1}{n^2}$. Então: $|\alpha_n - 0| = \frac{n+1}{n^2} \leq \frac{n+n}{n^2} = 2\frac{1}{n} = 2\beta_n$, $|\hat{\alpha}_n - 0| = \frac{n+3}{n^3} \leq \frac{n+3n}{n^3} = 4\frac{1}{n^2} = 2\hat{\beta}_n$.
- Logo, a taxa de convergência das sequências é: $\alpha_n = 0 + O(\frac{1}{n})$ e $\hat{\alpha}_n = 0 + O(\frac{1}{n^2})$.
- Resultando em melhor convergência para a sequência $\hat{\alpha}_n$.

Taxas de Convergência

- **Definição.** Suponha que $\lim_{h\to 0} G(h) = 0$ e $\lim_{h\to 0} F(h) = L$. Se existe uma constante positiva K, para um h suficientemente pequeno, tal que:

$$|F(h) - L| \leq K|G(h)|, \tag{15}$$

então $F(h) = L + O(G(h))$.

- É comum ter $G(h) = h^p$, tal que se deseja o maior $p > 0$ com $F(h) = L + O(h^p)$.
- **Exemplo.** Sabendo que o Polinômio de Taylor de ordem 3 para $f(h) = \cos(h)$, em torno de $h = 0$, é $\cos(h) = 1 - \frac{1}{2}h^2 + \frac{1}{24}h^4\cos(\xi(h))$ para algum número $\xi(h)$ entre 0 e h, mostre que: $\cos(h) + \frac{1}{2}h^2 = 1 + O(h^4)$:

Taxas de Convergência

- **Reposta.** Arranja-se os termos como: $\cos(h) + \frac{1}{2}h^2 = 1 + \frac{1}{24}h^4\cos(\xi(h))$.
- Note que $\cos(h) + \frac{1}{2}h^2$ converge para 1 quando $h \to 0$. Assim: $|(\cos(h) + \frac{1}{2}h^2) - 1| = |\frac{1}{24}\cos(\xi(h))|h^4 \leq \frac{1}{24}h^4$
- Seguindo a definição, faz-se $F(h) = \cos(h) + \frac{1}{2}h^2$, $L = 1$ e $G(h) = h^4$, tal que:
  $F(h) = L + O(G(h))$ resulta em:
  $\cos(h) + \frac{1}{2}h^2 = 1 + O(h^4)$.

Software Numérico

- Existem vários *softwares* para resolver problemas numéricos, como Maple, Mathematica, MATLAB e GNU Octave;
- No decorrer da disciplina será utilizado o GNU Octave, que é gratuito e está disponível para diferentes plataformas;
- O Octave pode ser baixado em https://www.gnu.org/software/octave/
- A linguagem do Octave é bem similar a linguagem do MATLAB;
- Os exercícios envolvendo algoritmos/programação devem ser feitos e entregue na linguagem do Octave;
- Exercícios **NÃO** serão aceitos em outras linguagens e/ou *softwares*, como MATLAB por exemplo.
- Tutorial: https://www.gnu.org/software/octave/octave.pdf

GNU Octave

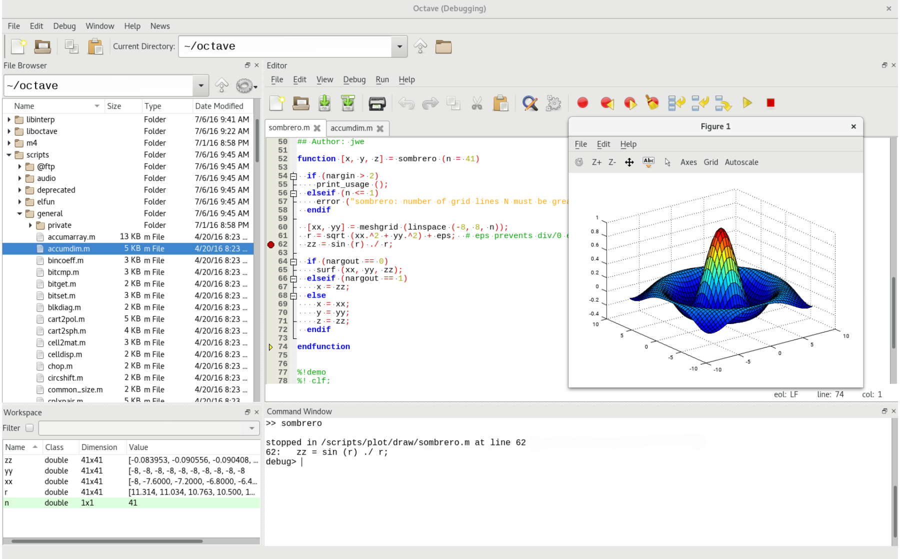


Figura: Interface do GNU Octave.

Octave Online

- Existe uma versão na Internet (não precisa instalar) disponível em: http://octave-online.net/

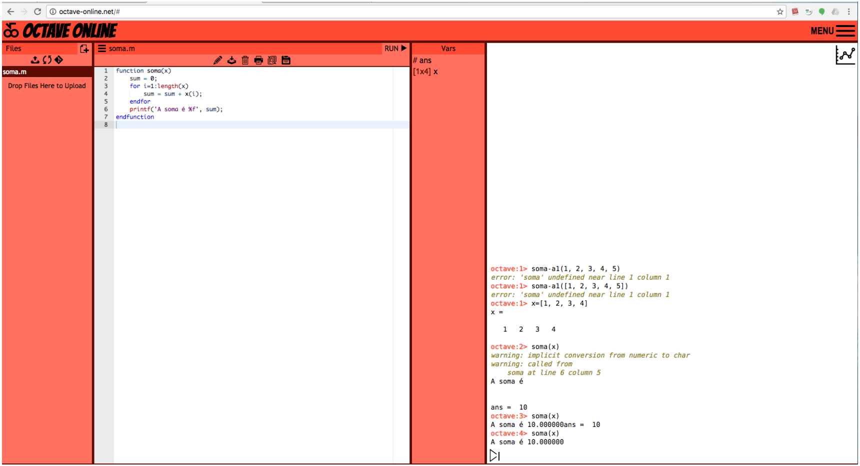


Figura: Interface do Octave Online.