# MATEMÁTICA COMPUTACIONAL

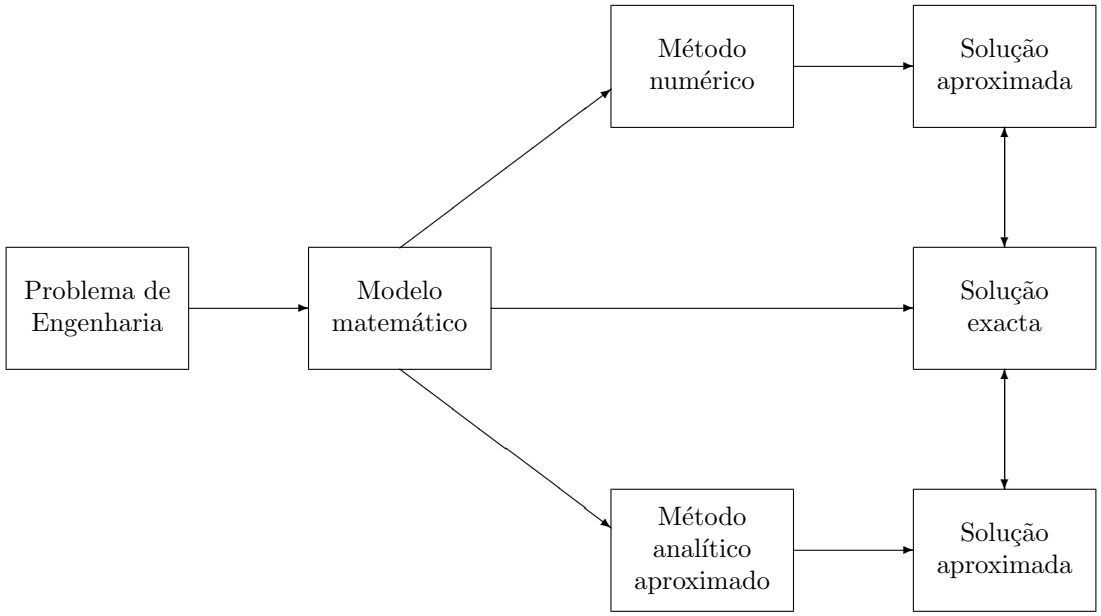
## Cap. 1. Representação de Números e Teoria de Erros

**Filipe J. Romeiras**

Departamento de Matemática
Instituto Superior Técnico

Apontamentos das aulas da disciplina do mesmo nome do 2º ano de
Mestrados Integrados e Licenciaturas em Ciências de Engenharia
do Instituto Superior Técnico

# 1. REPRESENTAÇÃO DE NÚMEROS E TEORIA DE ERROS




## Tipos de erro

• **Erros inerentes**:
◇ modelo matemático incompleto;
◇ erros nos dados, parâmetros e constantes matemáticas;
◇ exemplos:
(i) corpo em movimento vertical na atmosfera terrestre sujeito à força de atracção gravitacional da Terra e à força de resistência do ar;
(ii) a reacção de Belousov-Zhabotinski (oscilações químicas);
(iii) circuitos electrónicos não-lineares.
• **Erros de método (ou de truncatura ou de discretização)**:
◇ exemplos:
(i) cálculo do valor aproximado da raiz de uma função pelo método de Newton;
(ii) cálculo do valor aproximado de um integral usando a regra dos trapézios composta.
• **Erros computacionais**:
◇ erros de arredondamento;
◇ erros de "underflow" e "overflow".
• **Erros de programação**.

## Erro, erro absoluto, erro relativo ($\tilde{x} \approx x \in \mathbb{R}$):

Definição. Seja $x \in \mathbb{R}$ o valor exacto de uma grandeza real e $\tilde{x}$ um valor aproximado de $x$. Definem-se:

**Erro** de $\tilde{x}$ em relação a $x$: $e_{\tilde{x}} = x - \tilde{x}$

**Erro absoluto** de $\tilde{x}$ em relação a $x$: $|e_{\tilde{x}}|$

**Erro relativo** de $\tilde{x}$ em relação a $x \neq 0$: $\delta_{\tilde{x}} = \dfrac{e_{\tilde{x}}}{x}$, ou $|\delta_{\tilde{x}}|$

( Percentagem de erro: $100\delta_{\tilde{x}}(\%)$ ou $100|\delta_{\tilde{x}}|(\%)$ )

Nota. O erro relativo é invariante numa mudança de escala, i.e., sendo $y = kx$, $\tilde{y} = k\tilde{x}$, onde $k$ é uma constante não nula, então $\delta_{\tilde{y}} = \delta_{\tilde{x}}$.

Exemplo.

$$x = \frac{1}{3}, \qquad \tilde{x} = 0.3333, \qquad y = \frac{1}{3000}, \qquad \tilde{y} = 0.0003.$$
$$e_{\tilde{x}} = e_{\tilde{y}} = 0.0000333\ldots, \qquad \delta_{\tilde{x}} \approx 0.0001(0.01\%) \qquad \delta_{\tilde{y}} \approx 0.1(10\%)$$

## Representação de números

• Um número inteiro $x \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ é representado numa **base** $\beta \in \mathbb{N} \setminus \{0, 1\}$ (por exemplo, 10, 2, 16, 8, 12, 20, 60) por

$$x = \sigma(d_m\beta^m + d_{m-1}\beta^{m-1} + \cdots + d_1\beta^1 + d_0\beta^0)$$

onde

$$\sigma \in \{+, -\}, \qquad d_i \in \{0, 1, \ldots, \beta - 1\}, \quad i = 0, 1, \ldots, m, \qquad d_m \neq 0$$

Simbolicamente escreve-se

$$x = \sigma(d_m d_{m-1} \ldots d_1 d_0)_\beta$$

Exemplo. $198 = (198)_{10} = (11000110)_2$

Com efeito:

$$\begin{aligned}
198 &= 2 \times 99 = 2 \times (2 \times 49 + 1) = 2 \times (2 \times (2 \times 24 + 1) + 1) = \\
&= 2 \times (2 \times (2 \times (2 \times 12) + 1) + 1) = 2 \times (2 \times (2 \times (2 \times (2 \times 6)) + 1) + 1) = \\
&= 2 \times (2 \times (2 \times (2 \times (2 \times (2 \times 3))) + 1) + 1) = \\
&= 2 \times (2 \times (2 \times (2 \times (2 \times (2 \times (2 + 1)))) + 1) + 1) = \\
&= 2^7 + 2^6 + 2^2 + 2^1 = (11000110)_2
\end{aligned}$$

Nota. Os números inteiros são representados exactamente num computador. Se neste reservarmos $N + 1$ bits para números inteiros podemos representar todos os números inteiros tais que

$$-(2^N - 1) \leq x \leq (2^N - 1)$$

Exemplo. $N = 31$ : $2^N - 1 = 2.147.483.647$

• Um número real $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ é representado numa base $\beta \in \mathbb{N} \setminus \{0,1\}$, por

$$x = \sigma(d_m\beta^m + d_{m-1}\beta^{m-1} + \cdots + d_1\beta^1 + d_0\beta^0 +$$
$$+d_{-1}\beta^{-1} + d_{-2}\beta^{-2} + \cdots d_{-n}\beta^{-n} + \cdots)$$

onde

$$\sigma \in \{+,-\}, \qquad d_i \in \{0,1,\ldots,\beta-1\}, \quad i = m, m-1, \ldots, \qquad d_m \neq 0$$

Simbolicamente escreve-se

$$x = \sigma(d_m d_{m-1} \ldots d_1 d_0 . d_{-1} d_{-2} \ldots)_\beta$$

ou

$$x = \sigma(0.d_m d_{m-1} \ldots d_1 d_0 d_{-1} d_{-2} \ldots)_\beta \times \beta^{m+1}$$

Exemplo.

$$19 = (10011)_2, \qquad 0.875 = (0.111)_2,$$
$$19.875 = (10011.111)_2 = (0.10011111)_2 \times 2^{(101)_2}$$
$$0.1 = (0.11001100\ldots)_2 \times 2^{-(11)_2}$$

Com efeito:

$$19 = 2 \times 9 + 1 = 2 \times (2 \times 4 + 1) + 1 = 2 \times (2 \times (2 \times 2) + 1) + 1 = 2^4 + 2^1 + 2^0$$

$$0.875 = d_{-1} \times 2^{-1} + d_{-2} \times 2^{-2} + d_{-3} \times 2^{-3} + d_{-4} \times 2^{-4} + \ldots$$
$$1.750 = d_{-1} + d_{-2} \times 2^{-1} + d_{-3} \times 2^{-2} + d_{-4} \times 2^{-3} + \ldots \quad \Rightarrow \quad d_{-1} = 1$$
$$0.750 = d_{-2} \times 2^{-1} + d_{-3} \times 2^{-2} + d_{-4} \times 2^{-3} + \ldots$$
$$1.5 = d_{-2} + d_{-3} \times 2^{-1} + d_{-4} \times 2^{-2} + \ldots \quad \Rightarrow \quad d_{-2} = 1$$
$$0.5 = d_{-3} \times 2^{-1} + d_{-4} \times 2^{-2} + \ldots$$
$$1.0 = d_{-3} + d_{-4} \times 2^{-1} + \ldots \quad \Rightarrow \quad d_{-3} = 1, \qquad d_{-4} = d_{-5} = \cdots = 0$$

• Notação científica

$$x = \sigma\, m\, \beta^t$$

$$\text{(base) } \beta \in \mathbb{N} \setminus \{0,1\}, \qquad \text{(sinal) } \sigma \in \{+,-\}, \qquad \text{(expoente) } t \in \mathbb{Z}$$

$$\text{(mantissa) } m = (0.a_1a_2\ldots)_\beta \in [\beta^{-1}, 1[, \qquad a_i \in \{0,1,\ldots,\beta-1\}, \qquad a_1 \neq 0$$

Definição. Sejam $\beta \in \mathbb{N} \setminus \{0,1\}, n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}, t^-, t^+ \in \mathbb{Z}$. Designa-se por **sistema de ponto flutuante** na base $\beta$, com $n$ dígitos na mantissa, e expoentes variando entre $t^-$ e $t^+$, ao subconjunto dos números racionais

$$\mathbb{F} = \mathrm{FP}(\beta, n, t^-, t^+) = \{x \in \mathbb{Q} : \ x = \sigma\, m\, \beta^t\} \cup \{0\}$$

$$\sigma \in \{+,-\}, \qquad t \in \mathbb{Z}, \qquad t^- \leq t \leq t^+,$$

$$m = (0.a_1a_2\ldots a_n)_\beta \in [\beta^{-1}, 1-\beta^{-n}], \qquad a_i \in \{0,1,\ldots,\beta-1\}, \qquad a_1 \neq 0$$

Quando apenas for importante referir a base e o número de dígitos da mantissa, usamos a notação $\mathrm{FP}(\beta, n)$.

Proposição.

$$\mathrm{card}(\mathrm{FP}(\beta, n, t^-, t^+)) = 2N + 1, \qquad N = (t^+ - t^- + 1)(\beta - 1)\beta^{n-1}.$$

Nota. $N$ é o número de racionais positivos de $\mathbb{F}$ compreendidos entre

$$L^- = \beta^{-1} \times \beta^{t^-}, \qquad L^+ = (1 - \beta^{-n}) \times \beta^{t^+}.$$

Os restantes elementos de $\mathbb{F}$ são os simétricos destes e o número zero.

Exemplo: $\mathrm{FP}(2, 3, -1, 1)$, cujos elementos positivos são:

$$\begin{array}{lll}
(0.100)_2 \times 2^{-1} = \dfrac{4}{16} & (0.100)_2 \times 2^{0} = \dfrac{8}{16} & (0.100)_2 \times 2^{1} = \dfrac{16}{16} \\
(0.101)_2 \times 2^{-1} = \dfrac{5}{16} & (0.101)_2 \times 2^{0} = \dfrac{10}{16} & (0.101)_2 \times 2^{1} = \dfrac{20}{16} \\
(0.110)_2 \times 2^{-1} = \dfrac{6}{16} & (0.110)_2 \times 2^{0} = \dfrac{12}{16} & (0.110)_2 \times 2^{1} = \dfrac{24}{16} \\
(0.111)_2 \times 2^{-1} = \dfrac{7}{16} & (0.111)_2 \times 2^{0} = \dfrac{14}{16} & (0.111)_2 \times 2^{1} = \dfrac{28}{16}
\end{array}$$

Exemplo: Sistemas de ponto flutuante definidos pela Norma IEC559 (International Electronic Comission, 1989).

Formato simples: $\mathrm{FP}(2, 24, -125, 128)$

$$L^- = 2^{-126} \approx 0.118 \times 10^{-37}, \qquad L^+ = (1 - 2^{-24}) \times 2^{128} \approx 0.340 \times 10^{39},$$

$$N = 254 \times 2^{23} \approx 0.213 \times 10^{10}$$

Formato duplo: $\mathrm{FP}(2, 53, -1021, 1024)$

$$L^- = 2^{-1022} \approx 0.223 \times 10^{-307}, \qquad L^+ = (1 - 2^{-53}) \times 2^{1024} \approx 0.180 \times 10^{309},$$

$$N = 2046 \times 2^{52} \approx 0.921 \times 10^{19}$$

## Arredondamentos

Questão. Dado um número $x \in \mathbb{R}_{\mathbb{F}}$ e $x \notin \mathbb{F}$ qual o número $\mathrm{fl}(x) \in \mathbb{F}$ que o representa, onde $\mathbb{R}_{\mathbb{F}} = [-L^+, -L^-] \cup \{0\} \cup [L^-, L^+]$?

Definição. Dado $\mathbb{F} = \mathrm{FP}(\beta, n, t^-, t^+)$, e sendo

$$x = \sigma(0.a_1 a_2 \ldots a_n a_{n+1} \ldots)_\beta \times \beta^t,$$

definem-se as duas seguintes funções de arredondamento $\mathrm{fl}_c : \mathbb{R}_{\mathbb{F}} \to \mathbb{F}$ e $\mathrm{fl}_s : \mathbb{R}_{\mathbb{F}} \to \mathbb{F}$:

(i) Arredondamento por corte:

$$\mathrm{fl}_c(x) = \sigma(0.a_1a_2\ldots a_n)_\beta \times \beta^t$$

(ii) Arredondamento simétrico ($\beta$ par):

$$\mathrm{fl}_s(x) = \begin{cases} \sigma(0.a_1a_2\ldots a_n)_\beta \times \beta^t, & 0 \leq a_{n+1} < \dfrac{\beta}{2} \\ \sigma\left[(0.a_1a_2\ldots a_n)_\beta + \beta^{-n}\right] \times \beta^t, & \dfrac{\beta}{2} \leq a_{n+1} < \beta \end{cases}$$

ou, de uma forma equivalente,

$$\mathrm{fl}_s(x) = \mathrm{fl}_c\left(x + \frac{1}{2}\,\beta^{t-n}\right)$$

Nota.

(i) $\mathrm{fl}_c(x)$ é o número de $\mathbb{F}$ mais perto de $x$ entre 0 e $x$.

(ii) $\mathrm{fl}_s(x)$ é o número de $\mathbb{F}$ mais perto de $x$. Se houver dois números de $\mathbb{F}$ igualmente perto de $x$ então $\mathrm{fl}_s(x)$ é o maior deles.

Exemplo. Sendo $\pi = 3.1415926535\ldots$ e $\mathbb{F} = \mathrm{FP}(10, 7)$ então,

$$\mathrm{fl}_c(\pi) = 0.3141592 \times 10^{+1}, \qquad \mathrm{fl}_s(\pi) = 0.3141593 \times 10^{+1}.$$

Exemplo. Sendo $0.1 = x = (0.11001100\ldots)_2 \times 2^{-3}$ e $\mathbb{F} = \mathrm{FP}(2, 4)$ então

$$\mathrm{fl}_c(x) = (0.1100)_2 \times 2^{-3} = \frac{3}{32} = (0.09375)_{10}$$

$$\mathrm{fl}_s(x) = (0.1101)_2 \times 2^{-3} = \frac{13}{128} = (0.1015625)_{10}$$

## Erros de arredondamento

Proposição. Sendo $x \in \mathbb{R}_{\mathbb{F}}$ e $\tilde{x} = \mathrm{fl}(x) \in \mathbb{F} = \mathrm{FP}(\beta, n, t^-, t^+)$, então:

(i) Arredondamento por corte:

$$|e_{\tilde{x}}| < \beta^{t-n}, \qquad |\delta_{\tilde{x}}| < \beta^{1-n};$$

(ii) Arredondamento simétrico:

$$|e_{\tilde{x}}| < \frac{1}{2}\,\beta^{t-n}, \qquad |\delta_{\tilde{x}}| < \frac{1}{2}\,\beta^{1-n}.$$

Dem.:

$$x = \sigma(0.a_1a_2\ldots a_na_{n+1}\ldots)_\beta \times \beta^t, \qquad |x| \geq \beta^{-1+t}$$

(i) Arredondamento por corte:

$$\tilde{x} = \mathrm{fl_c}(x) = \sigma(0.a_1a_2\ldots a_n)_\beta \times \beta^t$$
$$e_{\tilde{x}} = x - \tilde{x} = \sigma(0.0\ldots 0a_{n+1}\ldots)_\beta \times \beta^t = \sigma(0.a_{n+1}a_{n+2}\ldots)_\beta \times \beta^{t-n}$$
$$|e_{\tilde{x}}| < \beta^{t-n}$$
$$|\delta_{\tilde{x}}| = \frac{|e_{\tilde{x}}|}{|x|} < \beta^{1-n}$$

(ii) Arredondamento simétrico:

(a) $0 \leq a_{n+1} < \dfrac{\beta}{2}$

$$\tilde{x} = \mathrm{fl_s}(x) = \sigma(0.a_1a_2\ldots a_n)_\beta \times \beta^t$$
$$e_{\tilde{x}} = \sigma(0.a_{n+1}a_{n+2}\ldots)_\beta \times \beta^{t-n}$$
$$|e_{\tilde{x}}| < \frac{\beta}{2}\,\beta^{-1}\,\beta^{t-n} = \frac{1}{2}\,\beta^{t-n}$$
$$|\delta_{\tilde{x}}| < \frac{1}{2}\,\beta^{1-n}$$

(b) $\dfrac{\beta}{2} \leq a_{n+1} < \beta$

$$\tilde{x} = \mathrm{fl_s}(x) = \sigma\left[(0.a_1a_2\ldots a_n)_\beta + \beta^{-n}\right] \times \beta^t$$
$$e_{\tilde{x}} = \sigma\left[(0.a_{n+1}a_{n+2}\ldots)_\beta - 1\right] \times \beta^{t-n}$$
$$|e_{\tilde{x}}| \leq \frac{1}{2}\,\beta^{t-n}$$
$$|\delta_{\tilde{x}}| < \frac{1}{2}\,\beta^{1-n}$$

Nota. O majorante do erro relativo depende de $\beta$, de $n$ e do tipo de arredondamento, mas <u>não</u> depende de $x$.

Definição. Dado um sistema FP$(\beta, n, t^-, t^+)$ define-se a **unidade de arredondamento do sistema** por

$$u_c = \beta^{1-n}, \qquad u_s = \frac{1}{2}\,\beta^{1-n}.$$

Exemplo. Sistemas definidos pela Norma IEC559.

FP(2, 24, -125, 128): $\quad u_s = 2^{-24} \approx 0.596046 \times 10^{-7}$

FP(2, 53, -1021, 1024): $\quad u_s = 2^{-53} \approx 0.111022 \times 10^{-15}$

## Operações aritméticas num sistema de ponto flutuante

Definição. Sendo $\circ : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ uma operação aritmética, $\circ = +, -, \times, \div$, define-se a operação aritmética correspondente num sistema de ponto flutuante $\mathbb{F}$, $\boxed{\circ} : \mathbb{R}_\mathbb{F} \times \mathbb{R}_\mathbb{F} \to \mathbb{F}$, por

$$x \boxed{\circ} y = \mathrm{fl}(\mathrm{fl}(x) \circ \mathrm{fl}(y))$$

Exemplo. Sendo $x = \pi$ e $y = \dfrac{333}{106}$ e considerando um sistema de ponto flutuante FP(10,

6, -10, 10) com arredondamento simétrico obtém-se:

$$x \boxed{+} y = 0.628310 \times 10, \qquad x \boxed{-} y = 0.800000 \times 10^{-4},$$

$$x \boxed{\times} y = 0.986934 \times 10, \qquad x \boxed{\div} y = 0.100003 \times 10$$

Note-se que:

$$x = \pi = 3.14159265358\ldots, \qquad \tilde{x} = 0.314159 \times 10$$
$$y = \frac{333}{106} = 3.14150943396\ldots, \qquad \tilde{y} = 0.314151 \times 10$$

## Algarismos significativos

Definição. Seja

$$\tilde{x} = \sigma(0.a_1a_2\ldots a_n)_{10} \times 10^t$$

uma aproximação de $x$ pertencente a FP$(10, n)$. Diz-se que o algarismo $a_i$ é **algarismo significativo** de $\tilde{x}$ se

$$|e_{\tilde{x}}| \leq \frac{1}{2}\, 10^{t-i}.$$

Nota.

(i) Se $a_i$, $i \geq 2$, é significativo então $a_j$, $1 \leq j < i$, são significativos.

(ii) Se $a_n$ é significativo então os $n$ algarismos de $\tilde{x}$ são significativos.

Nota. Se $\tilde{x}$ é obtido de $x$ por arredondamento simétrico então os $n$ algarismos de $\tilde{x}$ são significativos.

Exemplo. Sendo $\pi = 3.14159265358\ldots$, então:

(i) a aproximação $\tilde{\pi} = 3.141592$ tem 6 algarismos significativos;

$$e_{\tilde{\pi}} \approx 0.6535 \times 10^{-6}, \qquad \frac{1}{2}\, 10^{1-7} < |e_{\tilde{\pi}}| < \frac{1}{2}\, 10^{1-6}$$

(ii) a aproximação $\tilde{\tilde{\pi}} = 3.141593$ tem 7 algarismos significativos.

$$e_{\tilde{\tilde{\pi}}} \approx -0.3465 \times 10^{-6}, \qquad \frac{1}{2}\, 10^{1-8} < |e_{\tilde{\tilde{\pi}}}| < \frac{1}{2}\, 10^{1-7}$$

Exemplo. Número de algarismos significativos da representação de um número real nos sistemas de ponto flutuante definidos pela Norma IEC559 (considerando arredondamento simétrico).

Formato simples: FP(2, 24, -125, 128), $\qquad u \approx 0.596046 \times 10^{-7}$

6 ou 7 algarismos significativos

Formato duplo: FP(2, 53, -1021, 1024), $u \approx 0.111022 \times 10^{-15}$

15 ou 16 algarismos significativos

$$x = \sigma m 10^t, \qquad x - \tilde{x} = x\delta_{\tilde{x}}, \qquad |\delta_{\tilde{x}}| < u = m_u 10^{t_u}$$
$$|x - \tilde{x}| < m m_u 10^{t+t_u}, \qquad 0.1 m_u \leq m m_u < m_u$$

**Erros de "overflow" e "underflow"**

Definição. Os erros de **"overflow"** e **"underflow"** ocorrem quando $t \notin \{t^-, \ldots, t^+\}$. Se $t > t^+$ tem-se **"overflow"** enquanto se $t < t^-$ tem-se **"underflow"**.

Exemplo. Cálculo de $|x + iy|$ para

(i) $x = y = 10^{20}$; (ii) $x = 10^{20},\ y = 1$;

no sistema FP( 2, 24, -125, 128).

$$|x+iy| = \sqrt{x^2+y^2} = \begin{cases} |x|\sqrt{1+\left(\dfrac{y}{x}\right)^2}, & |x| \geq |y| \\ |y|\sqrt{1+\left(\dfrac{x}{y}\right)^2}, & |x| < |y| \end{cases}$$

(i) $x = 10^{20} = y$ : $\quad |x+iy| = 10^{20}\sqrt{2}$

(ii) $x = 10^{20},\ y = 1$ : $\quad |x+iy| = 10^{20}\sqrt{1+\left(\dfrac{1}{10^{20}}\right)^2} \approx 10^{20}$

Exemplo. Cálculo das raízes de $ax^2 + bx + c = 0$ para

(i) $a = 10^{20},\ \ b = -3 \times 10^{20},\ \ c = 2 \times 10^{20}$;

(ii) $a = 2,\ \ b = -3 \times 10^{20},\ \ c = 2$;

no sistema FP(2, 24, -125, 128).

$$x_- = -\frac{1}{2a}\left(b + \sqrt{b^2 - 4ac}\right), \qquad x_+ = -\frac{1}{2a}\left(b - \sqrt{b^2 - 4ac}\right)$$

(i) As raízes coincidem com as do caso $\ \bar{a} = 1,\ \ \bar{b} = -3,\ \ \bar{z} = 2$:

$$x_- = 1, \qquad x_+ = 2$$

(ii) $\quad x_- = -\dfrac{b}{2a}\left(1 + \sqrt{1 - \dfrac{4ac}{b^2}}\right), \qquad x_+ = \dfrac{c/a}{x_-}$

$$x_- = \frac{3 \times 10^{20}}{4}\left(1 + \sqrt{1 - \frac{16}{(3 \times 10^{20})^2}}\right) \approx \frac{3}{2} \times 10^{20}, \qquad x_+ \approx \frac{2}{3} \times 10^{-20}$$

**Propagação de erros (teoria linearizada)**

Definição. Diz-se que

$$f(x) \doteq h(x), \quad \text{quando} \quad x \to x^*,$$

i.e., $f$ é igual a $h$ em primeira aproximação quando $x \to x^*$, se

$$f(x) = h(x) + o(|h(x)|), \quad \text{quando} \quad x \to x^*,$$

onde o símbolo (de Landau) $o(|h(x)|)$, $x \to x^*$, designa uma função genérica $g$ tal que

$$\lim_{x \to x^*} \frac{|g(x)|}{|h(x)|} = 0.$$

Exemplo. $1 - \cos x \doteq \dfrac{x^2}{2}, \quad x \to 0.$

Proposição. Seja $\phi : I \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $\phi \in C^2(I)$. Sejam $x \in I$ e $\tilde{x} \in I$ um valor que aproxima $x$. Então:

$$e_{\phi(\tilde{x})} = \phi(x) - \phi(\tilde{x}) \doteq \phi'(x)\, e_{\tilde{x}} =: e^L_{\phi(\tilde{x})}, \quad \text{quando} \quad e_{\tilde{x}} \to 0,$$

e, no caso de ser $\phi(x) \neq 0$, $x \neq 0$,

$$\delta_{\phi(\tilde{x})} = \frac{e_{\phi(\tilde{x})}}{\phi(x)} \doteq p_\phi(x)\delta_{\tilde{x}} =: \delta^L_{\phi(\tilde{x})}, \quad \text{quando} \quad \delta_{\tilde{x}} \to 0,$$

onde

$$p_\phi(x) = \frac{x\phi'(x)}{\phi(x)}.$$

Chama-se a $|p_\phi(x)|$ o **número de condição** de $\phi$ em $x$.

Exemplo. $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}, \;\; \phi(x) = x^m, \;\; m \in \mathbb{N}_1$

$$\delta^L_{\phi(\tilde{x})} = m\delta_{\tilde{x}}, \qquad \delta_{\phi(\tilde{x})} = m\delta_{\tilde{x}} - \sum_{i=2}^{m} \binom{m}{i} (-\delta_{\tilde{x}})^i$$

Exemplo. $\delta^L_{f\circ g(\tilde{x})} = p_f(g(x))p_g(x)\delta_{\tilde{x}}$.

Proposição. Seja $\phi : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $\phi \in C^2(D)$. Sejam $x \in D$ e $\tilde{x} \in D$ um valor que aproxima $x$. Então:

$$e_{\phi(\tilde{x})} = \phi(x) - \phi(\tilde{x}) \doteq e^L_{\phi(\tilde{x})} = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial \phi}{\partial x_k}(x)\, e_{\tilde{x}_k}, \quad \text{quando} \quad \sum_{k=1}^{n} |e_{\tilde{x}_k}| \to 0,$$

e, no caso de ser $\phi(x) \neq 0$, $\sum_{k=1}^{n} |x_k| \neq 0$,

$$\delta_{\phi(\tilde{x})} = \frac{e_{\phi(\tilde{x})}}{\phi(x)} \doteq \delta^L_{\phi(\tilde{x})} = \sum_{k=1}^{n} p_{\phi,x_k}(x)\delta_{\tilde{x}_k}, \quad \text{quando} \quad \sum_{k=1}^{n} |\delta_{\tilde{x}_k}| \to 0,$$

onde

$$p_{\phi,x_k}(x) = \frac{x_k \frac{\partial \phi}{\partial x_k}(x)}{\phi(x)}.$$

Exemplo. Operações aritméticas ($x, y \in \mathbb{R}$)

| $\phi(x,y)$ | $\delta^L_{\phi(\tilde{x},\tilde{y})}$ | $\delta_{\phi(\tilde{x},\tilde{y})} - \delta^L_{\phi(\tilde{x},\tilde{y})}$ |
|---|---|---|
| $x + y$ | $\frac{x}{x+y}\delta_{\tilde{x}} + \frac{y}{x+y}\delta_{\tilde{y}}$ | $0$ |
| $x - y$ | $\frac{x}{x-y}\delta_{\tilde{x}} - \frac{y}{x-y}\delta_{\tilde{y}}$ | $0$ |
| $x \times y$ | $\delta_{\tilde{x}} + \delta_{\tilde{y}}$ | $-\delta_{\tilde{x}}\delta_{\tilde{y}}$ |
| $x \div y$ | $\delta_{\tilde{x}} - \delta_{\tilde{y}}$ | $\frac{\delta_{\tilde{y}}(\delta_{\tilde{x}} - \delta_{\tilde{y}})}{1 - \delta_{\tilde{y}}}$ |

Exemplo. $\phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}, \;\; \phi(x,y) = x^2 - y^2, \qquad \delta^L_{\phi(\tilde{x},\tilde{y})} = \frac{2}{x^2 - y^2}(x^2\delta_{\tilde{x}} - y^2\delta_{\tilde{y}})$

## Propagação de erros em algoritmos

Definição. Uma função $\phi : I \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ diz-se uma **função elementar** num sistema $\mathbb{F}$ se $\forall x \in I \cap \mathbb{F}$ o valor que aproxima $\phi(x)$ em $\mathbb{F}$ é dado por

$$\tilde{\phi}(x) = \mathrm{fl}(\phi(x)).$$

Proposição. Seja $\phi : I \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ uma função elementar num sistema $\mathbb{F}$. Seja $\tilde{x}$ um valor aproximado de $x \in I$. Então:

(1)
$$e_{\tilde{\phi}(x)} = \phi(x) - \tilde{\phi}(x) = \phi(x) - \mathrm{fl}(\phi(x)) = \phi(x)\delta_{\mathrm{arr},\phi}$$
onde $|\delta_{\mathrm{arr},\phi}| \leq u$, e $u$ é a unidade de arredondamento de $\mathbb{F}$.

(2)
$$\delta_{\tilde{\phi}(\tilde{x})} \doteq \delta^L_{\tilde{\phi}(\tilde{x})} = \delta^L_{\phi(\tilde{x})} + \delta_{\mathrm{arr},\phi}, \qquad \delta^L_{\phi(\tilde{x})} = p_\phi(x)\delta_{\tilde{x}}.$$

Dem.: (2)

$$\begin{aligned} e_{\tilde{\phi}(\tilde{x})} &= \phi(x) - \tilde{\phi}(\tilde{x}) \\ &= \phi(x) - \phi(\tilde{x}) + \phi(\tilde{x}) - \tilde{\phi}(\tilde{x}) \\ &\doteq \phi'(x)e_{\tilde{x}} + \phi(\tilde{x})\delta_{\mathrm{arr},\phi} \\ &\doteq \phi'(x)e_{\tilde{x}} + \phi(x)\delta_{\mathrm{arr},\phi} \end{aligned}$$

Nota. A definição de função elementar generaliza-se para funções de mais de uma variável e, em particular, para as operações aritméticas.

Definição. Por **algoritmo** entende-se uma sequência finita de operações elementares que conduz a um valor aproximado da solução de um problema.

Exemplo. Algoritmos para o cálculo de $z = \phi(x) = 1 - \cos x, \ \ x \in \mathbb{R}$:

Alg. 1: $u = \cos x = \theta(x), \qquad z = 1 - u = \psi(u)$

Alg. 2: $u_1 = \dfrac{x}{2}, \quad u_2 = \sin u_1, \quad u_3 = u_2^2, \quad z = 2 \times u_3$

Exemplo. Algoritmos para o cálculo de $z = \phi(x) = x_1^2 - x_2^2, \ \ x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$:

$$\text{Alg. 1:} \begin{cases} u_1 = x_1 \times x_1 = \theta_1(x) \\ u_2 = x_2 \times x_2 = \theta_2(x) \\ z = u_1 - u_2 = \psi(u) \end{cases} \qquad \text{Alg. 2:} \begin{cases} u_1 = x_1 + x_2 = \theta_1(x) \\ u_2 = x_1 - x_2 = \theta_2(x) \\ z = u_1 \times u_2 = \psi(u) \end{cases}$$

$\psi, \theta_1, \theta_2$ são em cada caso as funções elementares.

Exemplo. Algoritmo para o cálculo de $z = \phi(x), \ \ \phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$:

$$u = \theta(x), \qquad \theta : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p, \qquad\qquad z = \psi(u), \qquad \psi : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}.$$

Pondo $\theta = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_p)$ então $\theta_1, \ldots, \theta_p, \psi$ são as $p+1$ funções elementares.

Proposição. Suponhamos que o cálculo de $z = \phi(x), \ \ \phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, é efectuado por uma algoritmo $\phi_*$ com $p+1$ passos em que a cada passo corresponde uma função elementar a que está associado um certo erro de arredondamento. Seja $\tilde{x}$ um valor aproximado de $x$. Então o erro relativo total de $\tilde{z} = \tilde{\phi}_*(\tilde{x})$ em relação a $\phi(x)$ é dado por

$$\delta_{\tilde{z}} \doteq \delta^L_{\tilde{z}} = \delta^L_{\phi(\tilde{x})} + \delta^L_{\text{arr}},$$

onde

$$\delta^L_{\phi(\tilde{x})} = \sum_{k=1}^{n} p_{\phi,x_k} \delta_{\tilde{x}_k}, \qquad \delta^L_{\text{arr}} = \sum_{k=1}^{p+1} q_k \delta_{\text{arr},k}.$$

Os pesos $q_1, q_2, \ldots, q_{p+1}$ dependem do algoritmo e $|\delta_{\text{arr},k}| \leq u, \ \ \forall k \in \{1, 2, \ldots, p+1\}$.

Exemplo. No caso dos dois algoritmos para o cálculo de $z = 1 - \cos x$ obtêm-se os seguintes erros relativos:

Algoritmo 1: $\delta^L_{\tilde{z}} = \delta^L_{\phi(\tilde{x})} + \delta^L_{\text{arr}}$

$$\delta^L_{\phi(\tilde{x})} = p_\phi(x)\delta_{\tilde{x}}, \qquad p_\phi(x) = \frac{x \sin x}{1 - \cos x}$$

$$\delta^L_{\text{arr}} = \frac{-\cos x}{1 - \cos x}\, \delta_{\text{arr},\theta} + \delta_{\text{arr},\psi}$$

Algoritmo 2: $\delta_{\tilde{z}}^L = \delta_{\phi(\tilde{x})}^L + \delta_{\text{arr}}^L$

$$\delta_{\phi(\tilde{x})}^L = p_\phi(x)\delta_{\tilde{x}}$$

$$\delta_{\text{arr}}^L = p_\phi(x)\delta_{\text{arr},1} + 2\delta_{\text{arr},2} + \delta_{\text{arr},3} + \delta_{\text{arr},4}$$

Com efeito:

Algoritmo 1:

$$\delta_{\tilde{u}}^L = p_\theta(x)\delta_{\tilde{x}} + \delta_{\text{arr},\theta}, \qquad p_\theta(x) = \frac{x\theta'(x)}{\theta(x)} = \frac{-x\sin x}{\cos x}$$

$$\delta_{\tilde{z}}^L = p_\psi(u)\delta_{\tilde{u}}^L + \delta_{\text{arr},\psi}, \qquad p_\psi(u) = \frac{u\psi'(u)}{\psi(u)} = \frac{-u}{1-u} = \frac{-\cos x}{1-\cos x}$$

$$\delta_{\tilde{z}}^L = p_\psi(u)\left[p_\theta(x)\delta_{\tilde{x}} + \delta_{\text{arr},\theta}\right] + \delta_{\text{arr},\psi} = p_\psi(u)p_\theta(x)\delta_{\tilde{x}} + p_\psi(u)\delta_{\text{arr},\theta} + \delta_{\text{arr},\psi}$$

Algoritmo 2:

$$\delta_{\tilde{u}_1}^L = \delta_{\tilde{x}} + \delta_{\text{arr},1}$$

$$\delta_{\tilde{u}_2}^L = p_{u_2}(u_1)\delta_{\tilde{u}_1}^L + \delta_{\text{arr},2}, \qquad p_{u_2}(u_1) = \frac{u_1\cos u_1}{u_2}$$

$$\delta_{\tilde{u}_3}^L = 2\,\delta_{\tilde{u}_2}^L + \delta_{\text{arr},3}$$

$$\delta_{\tilde{z}}^L = \delta_{\tilde{u}_3}^L + \delta_{\text{arr},4} = 2\left[p_{u_2}(u_1)\left(\delta_{\tilde{x}} + \delta_{\text{arr},1}\right) + \delta_{\text{arr},2}\right] + \delta_{\text{arr},3} + \delta_{\text{arr},4}$$

$$2p_{u_2}(u_1) = p_\phi(x)$$

Exemplo. No caso dos dois algoritmos para o cálculo de $z = x_1^2 - x_2^2$ obtêm-se os seguintes erros relativos:

Algoritmo 1: $\delta_{\tilde{z}}^L = \delta_{\phi(\tilde{x})}^L + \delta_{\text{arr}}^L$

$$\delta_{\phi(\tilde{x})}^L = \frac{2}{z}\left(x_1^2\delta_{\tilde{x}_1} - x_2^2\delta_{\tilde{x}_2}\right),$$

$$\delta_{\text{arr}}^L = \frac{x_1^2}{z}\,\delta_{\text{arr},\theta_1} - \frac{x_2^2}{z}\,\delta_{\text{arr},\theta_2} + \delta_{\text{arr},\psi}$$

Algoritmo 2: $\delta_{\tilde{z}}^L = \delta_{\phi(\tilde{x})}^L + \delta_{\text{arr}}^L$

$$\delta_{\phi(\tilde{x})}^L = \frac{2}{z}\left(x_1^2\delta_{\tilde{x}_1} - x_2^2\delta_{\tilde{x}_2}\right),$$

$$\delta_{\text{arr}}^L = \delta_{\text{arr},\theta_1} + \delta_{\text{arr},\theta_2} + \delta_{\text{arr},\psi}$$

**Condicionamento e estabilidade numérica**

• Qualquer problema matemático pode ser descrito da seguinte forma:

> Seja $D$ o conjunto de dados do problema e seja $S$ o conjunto de todas as soluções (resultados) possíveis do problema. Seja $f : D \to S$ a aplicação que a cada elemento de $D$ associa um elemento de $S$, a solução do problema.

Definição. Um problema diz-se **estável** ou **bem posto** se a pequenos erros relativos dos dados correspondem pequenos erros relativos dos resultados. Caso contrário o problema diz-se **instável** ou **mal posto**. Em certos casos esta noção pode ser concretizada. Diz-se que o problema é **estável** para um dado $x \in D$ se existir uma constante $K \geq 0$ tal que é satisfeita a seguinte desigualdade:

$$\max_{1\leq j\leq m} |\delta_{\tilde{z}_j}| \dot{\leq} K \max_{1\leq i\leq n} |\delta_{\tilde{x}_i}|, \qquad \tilde{x} \in V_x,$$

onde $\tilde{z} = f(\tilde{x})$, $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, e $V_x \subset D$ é uma vizinhança de $x$. Nestes casos diz-se ainda que o problema é **bem condicionado** se $K$ é pequeno e **mal condicionado** se $K$ é grande.

Exemplo. Vimos que para $z = f(x)$, $\tilde{z} = f(\tilde{x})$, $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$,

$$\delta_{\tilde{z}} \doteq \delta_{\tilde{z}}^L = \sum_{i=1}^{n} p_{f,x_i} \delta_{\tilde{x}_i}.$$

O problema é pois mal posto para $x \in D$ se algum dos números de condição $p_{f,x_i}$ tender para infinito para esse $x$. Caso isto não aconteça podemos definir

$$K = \sum_{i=1}^{n} |p_{f,x_i}|.$$

• A resolução numérica deste problema significa que existe uma outra aplicação $f_* : D \to S$, que a cada elemento de $D$ associa um elemento de $S$, a solução numérica do problema. Neste caso para além dos erros dos dados temos de considerar os erros de arredondamento.

Definição. Um algoritmo diz-se **numericamente (ou computacionalmente) estável** se a pequenos erros relativos dos dados e a pequenos valores da unidade de arredondamento correspondem pequenos erros relativos nos resultados do algoritmo. Caso contrário o algoritmo diz-se **numericamente (ou computacionalmente) instável**. Em certos casos esta noção pode ser concretizada. Diz-se que o algoritmo é **numericamente estável** para um dado $x \in D$ se existir uma constante $K \geq 0$ tal que é satisfeita a seguinte desigualdade:

$$\max_{1\leq j\leq m} |\delta_{\tilde{z}_j}| \dot{\leq} K \left( \max_{1\leq i\leq n} |\delta_{\tilde{x}_i}| + u \right), \qquad \tilde{x} \in V_x,$$

onde $\tilde{z} = \tilde{f}_*(\tilde{x})$ e $V_x \subset D$ é uma vizinhança de $x$. (Recorde-se que a unidade de arredondamento é um majorante de todos os erros relativos de arredondamento.)

Exemplo. Vimos que para $z = f(x), \quad \tilde{z} = \tilde{f}_*(\tilde{x}), \quad f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$,

$$\delta_{\tilde{z}} \doteq \delta_{\tilde{z}}^L = \sum_{i=1}^{n} p_{f,x_i} \delta_{\tilde{x}_i} + \sum_{i=1}^{p+1} q_i \delta_{\text{arr},i}.$$

O algoritmo é pois numericamente instável para $x \in D$ se algum dos números de condição $p_{f,x_i}$ ou algum dos $q_i$ tender para infinito para esse $x$. Caso isto não aconteça podemos definir

$$K = \max \left\{ \sum_{i=1}^{n} |p_{f,x_i}|, \sum_{i=1}^{p+1} |q_i| \right\}.$$

Exemplo. O problema de cálculo de $z = 1 - \cos x$ é um problema mal posto para $x = 2k\pi, \quad k \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$. O Algoritmo 2 é numericamente instável para os mesmos valores de $x$. O Algoritmo 1 é também numericamente instável para $x = 0$.

Com efeito:

Algoritmo 1: $\delta_{\tilde{z}}^L = p_\phi(x)\delta_{\tilde{x}} + q(x)\delta_{\text{arr},\theta} + \delta_{\text{arr},\psi}$

Algoritmo 2: $\delta_{\tilde{z}}^L = p_\phi(x)\delta_{\tilde{x}} + p_\phi(x)\delta_{\text{arr},1} + 2\delta_{\text{arr},2} + \delta_{\text{arr},3} + \delta_{\text{arr},4}$

$$p_\phi(x) = \frac{x \sin x}{1 - \cos x}, \qquad q(x) = \frac{-\cos x}{1 - \cos x}$$

$p_\phi$ é singular para $x = 2k\pi, \quad k \in \mathbb{Z}$; $\quad \lim_{x \to 0} p_\phi(x) = 2.$

$q$ é singular para $x = 2k\pi, \quad k \in \mathbb{Z}$.