Anales PANEL'81/12 JAIIO
Sociedad Argentina de informática
e Investigación Operativa. Buenos Aires, 1981

LABORATÓRIO DE MATEMÁTICA COMPUTACIONAL

Dalcidio Moraes Claudio
Laira Vieira Toscani

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Pós-Graduação em Ciência da Computação
Ipirange 853, Porto Alegre, Brasil.

OBJETIVOS

São apresentados os objetivos e a natureza da Matemática Numérica, sendo definido o conceito de "algoritmo numérico" e os critérios de eficiência e eficácia de um algoritmo.

É feita uma análise isolada das partes que constituem um processo de solução de um certo problema, desde a aplicação do modelo-matemático até o truncamento das iterações.

Pretende-se com isso obter que o estudo da Matemática Numérica passe a ser menos algoritmico e mais criativo, onde a aplicação de um método seja apenas uma parte do processo e não o processo em si.

Este trabalho faz parte do projeto "Laboratório de Cálculo Numérico", parcialmente financiado pela FINEP - Financiadora de Estudos e Projetos.

INTRODUÇÃO

Com o desenvolvimento dos computadores nas duas últimas décadas, a aplicação de métodos numéricos à resolução de problemas técnicos e científicos teve um notável crescimento, haja visto a sensível melhora em exatidão e tempo de resposta.

Não tentaremos aqui formalizar uma definição de Matemática Numérica, nos bastará uma idéia bem próxima. Entendemos por Matemática Numérica o desenvolvimento de métodos operacionais construtivos para resolução de problemas que se deixam representar em forma matemática.

Por métodos construtivos entendemos todo método que envolve apenas um sistema com um nº finito de operações elementares não ambíguas dadas 'a priori', utilizadas em um número finito de vezes e que "construirão" todo o processo de cálculo envolvido.

Dentro da Matemática Numérica foi escolhido o sistema de operações aritméticas, passando estas a constituir o elemento básico e comum a todos métodos empregados pela primeira. Tal escolha é devido a facilidade da implementação automática, facilidade de compreensão pelo homem e possibilidade de, em se combinando, serem capazes de "construir" métodos mais complexos.

A Matemática Numérica tem por objetivos estudar processos numéricos (algoritmos) para solução de problemas visando a máxima economia em termos dos fatores envolvidos.

ALGORITMOS

O conceito de algoritmos é importante, uma vez que a Matemática Numérica faz dele uma de suas principais ferramentas.

O algoritmo, enfocado de um modo não formal, é não mais que uma seqüência de instruções ordenadas de maneira a dar em seu decurso uma solução para um problema específico. Tais instruções devem aparecer em número finito e ser executáveis mecânicamente com uma quantidade limitada de esforço.

Um algoritmo poderá depender ou não de informações iniciais (entrada), mas terá obrigatoriamente que produzir uma informação final (saída).

ALGORITMOS NUMÉRICOS

Não proporemos aqui nenhuma definição exata, exigindo que o leitor tenha apenas uma idéia intuitiva. Para uniformizar esta idéia tão essencial ao decorrer do trabalho, citaremos as principais características de algoritmos numéricos.

1) Inexistência de Erro Lógico

Esta característica se baseia na " exigência" de que:

i) haja um ponto de partida, mesmo não havendo entradas;

ii) haja finitude das instruções e continuidade de uma em outra até uma instrução de parada, tendo havido no mínimo uma saída.

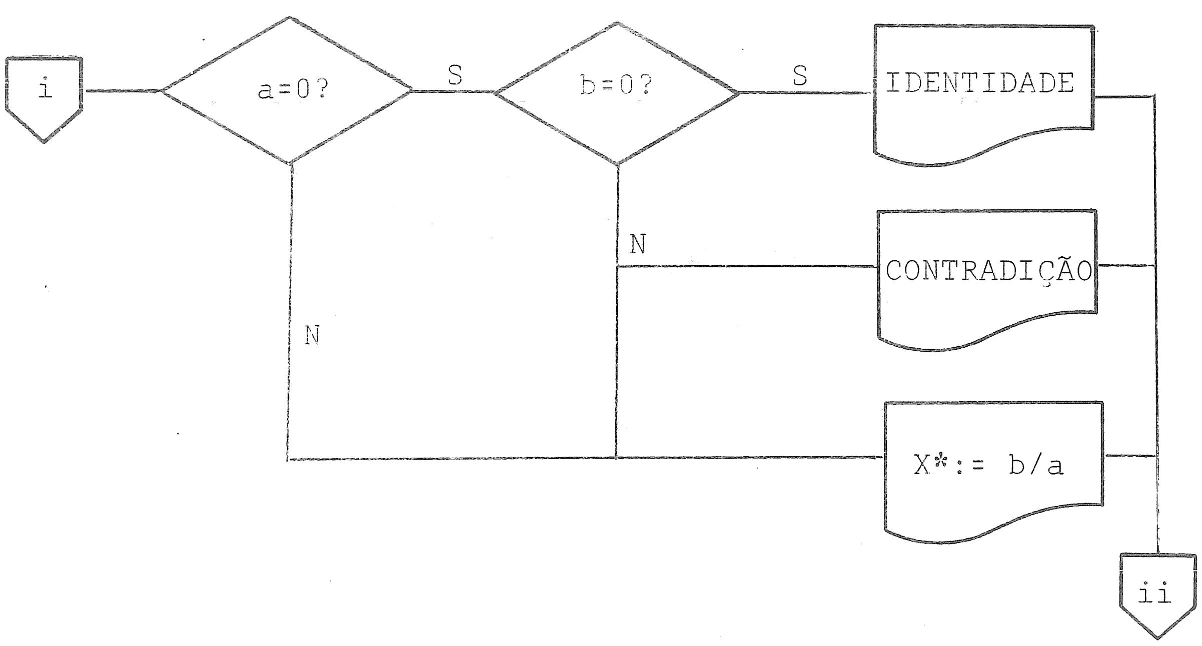
Isto implica em uma previsão completa de todas as tendências do processo, como deixa claro o seguinte exemplo:

Exemplo:

Procura-se a solução X* da equação ax = b
Falso seria, logicamente, substituir X* = b/a
O caso exigiria a seguinte análise:

$$X^* := \begin{cases} a = 0 & \begin{cases} \text{para } b = 0 \text{ IMPRIMA: IDENTIDADE} \\ \text{para } b \neq 0 \text{ IMPRIMA: CONTRADIÇÃO} \end{cases} \\ a \neq 0 & \text{IMPRIMA: } b/a \end{cases}$$

diagrama:



2) Inexistência de Erro Operacional

Seja T o conjunto dos números possíveis de serem representados por uma máquina e que valha:

i) $\forall\ x \in T,\ -x \in T$

ii) $\exists\ t_1, t_2 \in T$ tal que
$t_1 := \inf \{x/x \in T \wedge x > 0\}$
$t_2 := \sup \{x/x \in T \wedge x > 0\}$

xigê.icia ii é: não deve ocorrer valores Y que satisfaçam $|Y| < t_1$ UNDERFLOW) ou $|Y| > t_2$ (OVERFLOW).

Exemplo:

Seja $z := x + iy \in \mathbb{C}$; $x,y \in \mathbb{R}$
Procura-se o valor absoluto de z, i é, $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$.
Aqui poderíamos ter overflow de x^2 ou y^2 embora valha $x^2 + y^2 \leq t_2$, como no caso em que $x = 0$ e $y = t_2$. Aqui não temos erro lógico mas sim aritmético.
Uma solução seria:

$$z := \begin{cases} 0 & \text{para } x = y = 0 \\ |x|\sqrt{1 + (y/x)^2} & \text{para } |x| \geq |y| \\ |y|\sqrt{1 + (x/y)^2} & \text{para } |y| > |x| \end{cases}$$

que satisfaz 1 e 2.

3) Quantidade finita de cálculos

O algoritmo usado deve terminar após um número finito de passos. Seria aconselhável se o número de ciclos ou passos fosse estimado 'a priori'.

Aqui faz-se necessário um critério de parada, ver 1 .

4) Existência de um Critério de Exatidão

Todo o resultado, em virtude das limitações de precisão da máquina e exatidão desta e do método, deverá enquadrar-se em um critério de exatidão fornecido de antemão de modo a possibilitar que um resultado aceitável seja escrito na forma:

Resultado: = Valor Aproximado + Limite de Erro

5) Com precisão infinita os limites de erro devem convergir a zero

Essa exigência estabelece a dependência entre a solução ideal em $\mathbb{R}$ e a solução de máquina. Sem essa condição de convergência a solução de máquina não precisará necessariamente estar relacionada com a solução em $\mathbb{R}$.

6) Eficiência

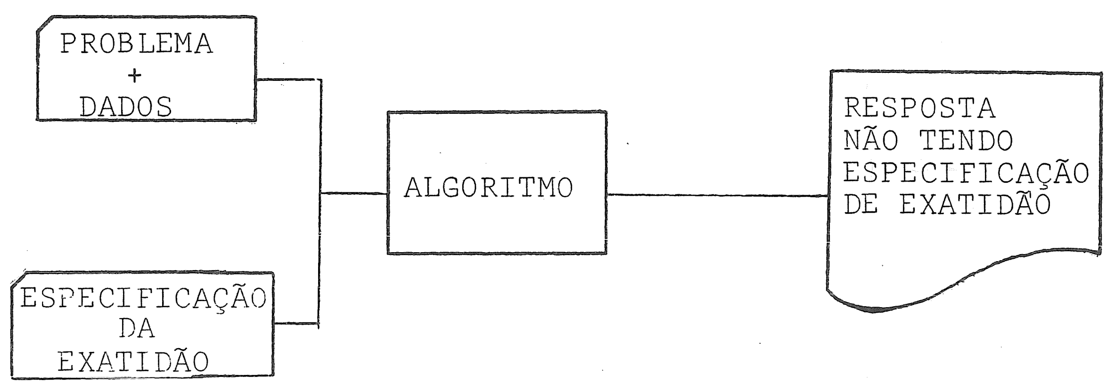
Quando se deseja encontrar a solução para um problema, sempre visamos obter economia, então prevemos um certo conjunto de condições com respeito a fatores envolvidos no processo de solução e, conforme o resultado que queremos obter, estabelecemos um compromisso entre estas condições de modo a favorecer aquelas que nos forem mais vantajosas no caso. Tais fatores são: tempo, precisão, volume de dados de referência, volume de memória (computador), dificuldades de representação, etc... Sobre eles formulamos condições tais como rapidez, alta precisão, poucos dados de referência, menor espaço de memória, facilmente representável, etc...

Podemos inclusive pensar em termos mais concretos, estabelecendo um conceito, ainda que incipiente, de custo operacional por quantidade de informação ou seja, ponderar com um certo custo relativo cada um dos fatores (também chamados esforços) e depois computá-los em busca da mínima soma que nos possibilite, à máxima satisfação de nossos objetivos.

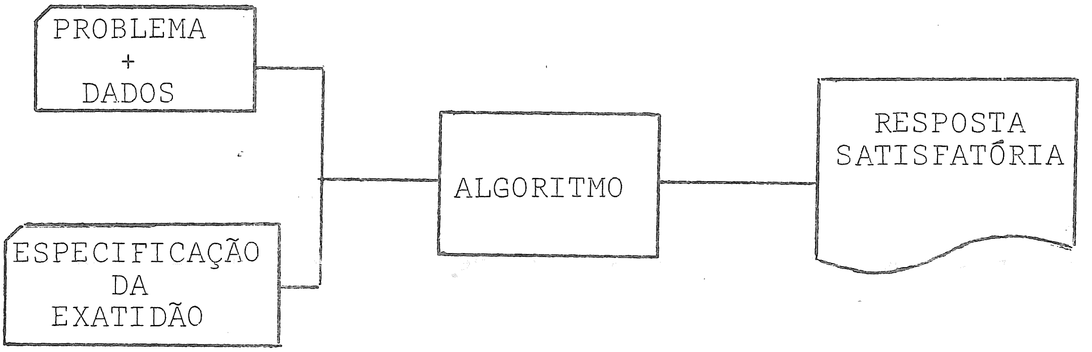
Faz-se necessário, agora, salientar a diferença, para fins da Matemática Numérica, existente entre eficiência e eficácia dos processos de cálculo.

Eficácia é a capacidade do processo em produzir uma resposta correta para o problema dado, enquanto que eficiência, além de intuir a idéia anterior, exige que o processo seja econômico nos termos que se cita acima.

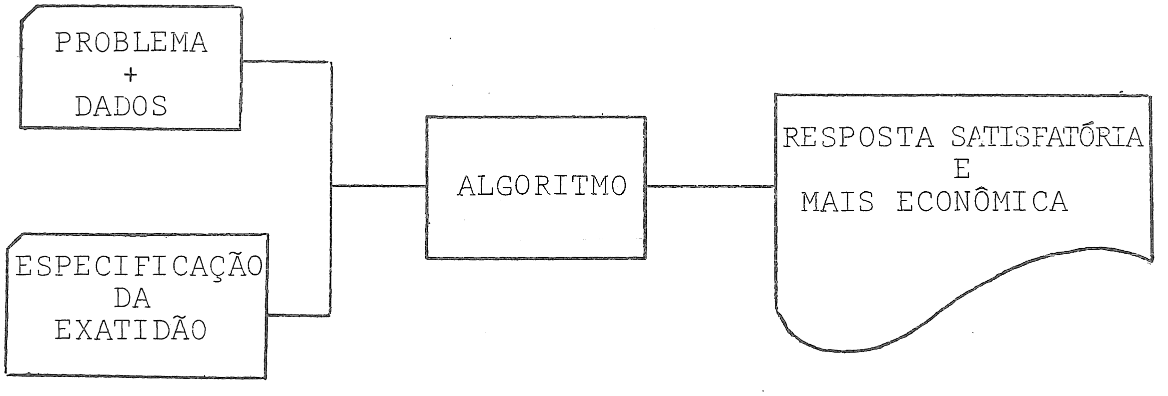
Algoritmo não eficaz é aquele que não consegue trazer uma resposta satisfatória a um problema dado:



Algoritmo eficaz é aquele que produz uma resposta satisfatória, dentro do critério de exatidão, mas pode deixar de ser satisfatório na medida em que é anti-econômico.



Algoritmo eficiente é aquele, dentre os algoritmos eficazes, que produz a melhor resposta em termos de custo operacional, i é, produz uma resposta mais vantajosa.



Exemplo:

Um exemplo clássico de eficácia com ineficiência é o algoritmo de CRAMER para solução de Sistemas de Equações Lineares n x n.

Tal algoritmo envolve no mínimo $(n + 1)!\ n - 1$ operações aritméticas (n = ordem do sistema). Analise o quadro a seguir:

MÉTODO	n = 5	n = 10	n = 20
CRAMER: determinantes pela definição	2,5s	3,4 dias	20 milhões de anos
CRAMER: determinantes por LAPLACE	0,45s	6 min	5 meses
GAUSS: método de eliminação	36 ms	0,22s	1,5s

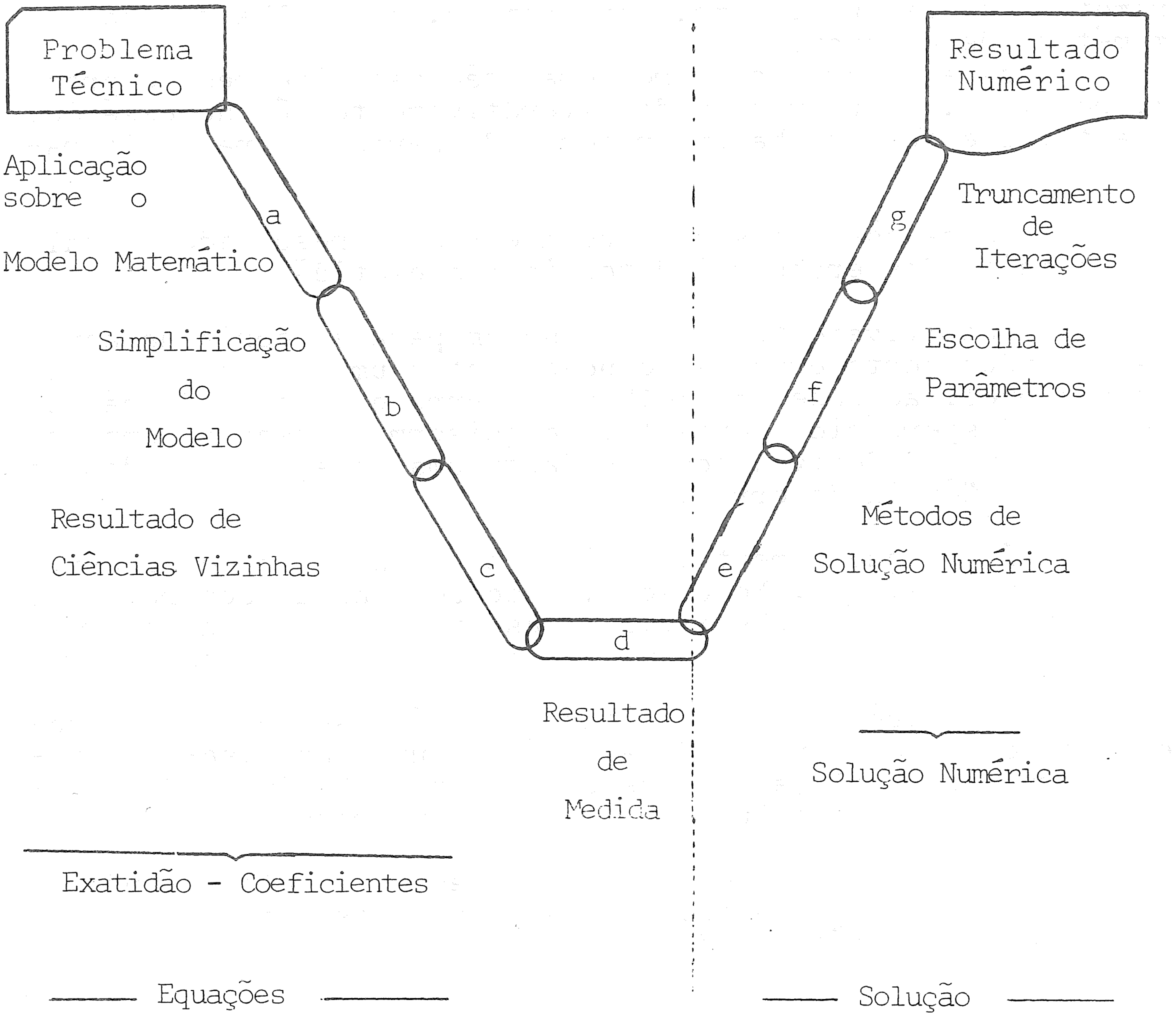
O método de CRAMER é ineficiente por disperdiçar o fator tempo chegando ao ponto de ser em termos práticos impossível a solução.

Obs.: A tabela anterior foi construída para um computador que realiza adições e subtrações em 60 μs e multiplicações em 400 μs.

RESOLUÇÃO DE UM PROBLEMA GENÉRICO

Dado um certo problema técnico, para chegarmos a um resultado numérico, faz-se necessário percorrer uma seqüência pré-estabelecida de passos isolados, dizendo respeito cada um deles, a um procedimento específico da solução. Para cada um destes procedimentos existe uma parcela, também específica, de erro que se acumula ao montante final de erros. Desejamos detalhar, um a um, os passos envolvidos no processo, conforme sua modalidade de atuação, visando com isso, descobrir as causas de cada tipo de erro e sugerir meios de eliminá-los ou minimizá-los.

Idéia da cadeia de passos para solução Numérica



a) o problema técnico precisa ser aplicado sobre um modelo matemático para ser passível de interpretação e conseqüente solução.

b) acontece, de modo freqüente, que o modelo usado para uma certa solução numérica necessita simplificações. A essa etapa também pertence a aproximação de valores de contorno.

c,d) nas equações ocorrem coeficientes, os quais foram obtidos de ciências vizinhas, como, por exemplo, Termodinâmica ou de medidas, e, por isso, já providos de erros.

Obs.: Neste ponto, nós já dispomos das equações a serem resolvidas pelas máquinas digitais.

e) é preciso escolher um método numérico de solução.

f) no método de solução devem ser escolhidos certos parâmetros de cálculo, como, por exemplo, a escolha do "passo" num método de diferenças.

g) a maioria dos problemas são não-lineares e precisam, por isso, ser resolvidos iterativamente. É necessário, portanto, que se escolha um critério de parada para a iteração.

Todos esses passos causam erros no resultado final. Aqui, o maior dos erros vai determinar a exatidão.

Intuitivamente: se a passagem para a teoria da aproximação induz certo erro na solução, então uma iteração com uma certa precisão pode não melhorar o erro e o tempo de cálculo é mero disperdício. Portanto, se quisermos usar o tempo de cálculo de modo efetivo, devemos fazer uma análise cuidadosa da nossa seqüência de erros.

É, frequentemente, difícil dizer algo sobre os erros que ocorrem em a. e b. No caso b. pode-se usar um controle "a posteriori", isto é, substituir o resultado aproximado nas equações iniciais e assim obter uma idéia sobre a grandeza do erro.

A influência das constantes empíricas (em c e d) sobre a solução pode ser obtida através de uma análise-sensitiva. Observa-se a solução com os coeficientes ± limite de erros, o que mostra a influência dos erros no resultado final.

A seqüência de erros que os passos a. até d. induzem são dados fixos e, portanto, não mais sujeitos a melhoras pela escolha de outros métodos de solução.

BIBLIOGRAFIA

1. CLAUDIO, Dalcidio M. Laboratório de Cálculo Numérico. Porto Alegre, UFRGS/CPGCC, 1980-1981.

2. PARLETT, Beresford. Progress in Numerical Analysis. Siam Review, 20(3), July 1978.

3. EVANS, D. J. Software for Numerical Mathematics. London, Academic Press, 1974.

4. FORSYTHE, George, E. et alli. Computer Methods for Mathematical Computations. Englewood Cliffs, N.J., 1977.

5. WILKINSON, J. H. Rouding Errors in Algebraic Process. Englewood Cliffs, N. J. Prentice-Hall, 1963. (Notes on Applied Science, 32).

6. CONTE, S.D. & de BOOR, C. Elementary Numerical Analysis, on algorithmic approach. New York, McGraw-Hill, 1972.

7. STOER, Josef. Einführung in die Numerische Mathematik I. Berlin, Springer Verlag, 1976.

8. JENNINGS, Alan. Matrix Computation for Engineers and Scientists. New York, John Wiley, 1973.

9. WILKINSON, J.H. & REINSCH, C. Handbook for Automatic Computation. Berlin, Springer, 1971. v.2.

10. JOHNSON, L. W. & RIESS, R. D. Numerical Analysis. Massachusetts, Addison-Wesley, 1977.

11. FORSYTHE, G. & MOLER, C. B. Computer Solution of Linear Algebraic Systems. Englewood Cliffs, N.J., Prentice--Hall, 1967.

12. SHOUP, Terry E. A practical Guide to Computer Methods for Engineers. Englewood Cliffs, N. J., Prentice-Hall, 1979.

13. DORN, W. S. & Mc CRACKEN, D. D. Cálculo Numérico com Estudos de Casos em Fortran IV. Rio de Janeiro, Campus, 1978.

14. ALBRECHT, Peter. Análise Numérica - um curso moderno. Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, 1973.

15. SOUTHWORTH, R. W. & DELEEUW, S. L. Digital Computation and Numerical Methods. New York, McGraw-Hill, 1965.