Expansões Assintóticas, Validação de Códigos e Estimativas de Erros

Alexandre Roma

2008.10.17]

---

1 "Oh-grande"

Diremos que $f(x)$ tem a ordem de $g(x)$, $f(x)$=O$(g(x))$, para x tendendo a inifinito se e somente se existirem $x_0 \in \mathbb{R}$ e uma constante positiva M tais que

$$|f(x)| \leq M|g(x)|\,, \quad x > x_0.$$

Similarmente, para descrever o comportamento de f numa vizinhança de um ponto a,

$$f(x) = \mathrm{O}(g(x))\,, \quad \text{para } x \to a\,,$$

se e somente se existirem constantes positivas δ e M tais que

$$|x-a| < \delta \Rightarrow |f(x)| \leq M|g(x)|.$$

O conceito de "Oh-grande" é empregado, por exemplo, em:

(1) Quão bem uma soma finita aproxima um dado valor ou uma dada função (e.g. séries de Taylor truncadas, séries assintóticas).
(2) Na análise de complexidade computacional.

Exemplo 1. Considere $f \in C^3(\mathbb{R})$ cuja série truncada de Taylor em torno de x_0 é dada por

$$f(x_0+h) = f(x_0) + h\,\frac{df(x_0)}{dx} + \frac{h^2}{2}\frac{d^2f(x_0)}{dx^2} + \frac{h^3}{6}\frac{d^3f(\xi)}{dx^3}\,,$$

para algum ξ no intervalo formado por x_0 e x_0+h. Se f tem derivadas limitadas numa vizinhança do ponto x_0 (isto é, se existirem $C > 0$ e $\delta > 0$ tais que $|x - x_0| < \delta \Rightarrow |d^kf(x_0)/dx^k| \leq C$, para $k = 1, 2$ e 3), então

$$|D_+f(x_0) - \frac{df(x_0)}{dx}| = |h|\,|\frac{d^2f(x_0)}{dx^2} + h\frac{d^3f(x_0)}{dx^3}| \leq C|h|(1+\delta)\,,$$

onde $D_+f(x_0) \doteq [f(x_0+h)-f(x_0)]/h$. Da desigualdade anterior e da definição de "Oh-grande" pode-se escrever

$$D_+f(x_0) - \frac{df(x_0)}{dx} = \mathrm{O}(h)\,, \quad \text{para } x \to x_0.$$

Exemplo 2. Complexidade computacional. O número total de operações aritméticas envolvidas no processo de resolução de um sistema linear pelo Método de Eliminação de Gauss é [1]

$$T(n) = \frac{4n^3+9n^2-7n}{6}\,,$$

onde n é a ordem da matriz. Vê-se que $T(n) = \mathrm{O}(n^3)$ para $n \to +\infty$, pois

$$|T(n) = |\frac{4n^3+9n^2-7n}{6}| \leq 4n^3+9n^2+7n \leq 20n^3\,, \quad n > 1.$$

A constante positiva C vale, claro, 20.

2 Expansões assintóticas

O texto a seguir foi baseado em [2]. Uma soma finita $\sum_{n=0}^{N} f_n(\epsilon)$ é uma representação assintótica de $f(\epsilon)$ quando $\epsilon \to 0$ se e somente se, para todo $M \leq N$,

$$\frac{f(\epsilon) - \sum_{n=0}^{M} f_n(\epsilon)}{f_M(\epsilon)} \to 0\,, \quad \text{para } \epsilon \to 0\,,$$

isto é, *o resto* é menor que a última parcela adicionada na soma, para ϵ suficientemente pequeno. Se uma soma tem esta propriedade assintótica, escreve-se

$$f(\epsilon) \sim \sum_{n=0}^{N} f_n(\epsilon)\,, \quad \text{para } \epsilon \to 0\,.$$

Freqüentemente, as parcelas $f_n(\epsilon)$ são dadas por potências de ϵ multiplicadas por coeficientes constantes, $a_n\epsilon^n$. Neste caso,

$$f(\epsilon) \sim \sum_{n=0}^{N} a_n\epsilon^n\,,$$

f é representada por uma expansão (ou série) assintótica de potências.

Exemplo 3. Função exponencial, $f(\epsilon) = \exp(\epsilon)$. Usando a expansão de Taylor da função exponencial, $\exp(\epsilon) = \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon^n/n!$, vê-se que

$$\frac{\exp(\epsilon) - \sum_{n=0}^{M} \epsilon^n/n!}{\epsilon^M} = \sum_{n=M+1}^{+\infty} \frac{\epsilon^{n-M}}{n!} \to 0\,, \quad \text{para } \epsilon \to 0\,.$$

Comentário 1: *Toda série de potências convergente fornece uma representação assintótica. Entretanto, como ver-se-á em breve, nem toda a representação assintótica fornece uma série convergente!*

Exemplo 4. Um exemplo surpreendente. Considere a função dada pela integral transcendente[1]

$$f(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-t^2)\, dt.$$

O integrando acima admite expansão convergente em série de Taylor para qualquer valor de t . É possível mostrar que integrando-a termo a termo obtém-se uma série de potências para $f(z)$ dada por

$$f(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{-t^{2n}}{n!}\, dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n z^{2n+1}}{(2n+1)n!} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(z - \frac{z^3}{3} + \frac{z^5}{10} - \frac{z^7}{42} + \cdots \right),$$

a qual também convergirá para todo o valor de z.

Para aproximar $f(z)$ para $z = 1$ com precisão de 10^{-5} são necessários 8 termos. Para manter a mesma precisão, à medida que z cresce, são necessários mais e mais termos. Para $z = 2$ são necessários 16 termos, para $z = 3$ são necessários 31 termos e para $z = 5$ são necessários 75 termos! Além do aumento progressivo e rápido para valores z mais elevados (aumento do custo computacional), note que se está bastante vulnerável a erros oriundos da aritmética de ponto flutuante pois se tem ordens de grandeza bastante díspares vindas de termos da forma z^n.

A mesma função $f(z)$ também é dada por

$$f(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{+\infty} \exp(-t^2)\, dt.$$

Integração por partes resulta em termos que formam uma soma finita mais um termo integral remanescente. Por exemplo, após integrar por partes 4 vezes obtém-se

$$f(z0 = 1 - \frac{\exp(-z^2)}{z\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{1}{2z^2} + \frac{1 \times 3}{(2z^2)^2} - \frac{1 \times 3 \times 5}{(2z^2)^3} + \mathrm{O}(z^{-8}) \right).$$

[1] Esta é a função erro, comumente referenciada como $\mathrm{erf}(z)$ - veja, por exemplo, http://mathworld.wolfram.com/Erf.html

É possível mostrar que, ao se continuar o processo de integração por partes indefinidamente, a série obtida desta forma diverge para qualquer valor de z !!! Entretanto, ao contrário do que se pode pensar, somas finitas obtidas a partir deste procedimento são extremamente úteis. Veja, para aproximar $f(z)$ para $z = 2.5$ com precisão de 10^{-5} são necessários 3 termos. Para manter a mesma precisão, para qualquer $z > 3$ são necessários apenas 2 termos! Para "enquadrar" o exemplo anterior no contexto de representação assintótica basta "enxergar" o pequeno parâmetro ϵ como sendo z^{-1}.

Comentário 2: *Séries assintóticas (infinitas) podem não convergir mas, mesmo assim, representações assintóticas (baseadas em somas parciais finitas destas séries) podem ser muito úteis.*

Exemplo 5. Expansão assintótica do erro global em aproximação numérica da solução de equações diferenciais ordinárias.

Considere o Problema de Cauchy $y'(t) = f(t, y(t))$ satisfazendo $y(t_0) = y_0$. Se $\bar{y}(t)$ e $\eta(t, \Delta t)$ forem, respectivamente, a solução exata e a aproximação numérica fornecida por um esquema numérico de ordem p, sob "certas condições de regularidade" [3] sobre a função $f(t, y)$, então é possível mostrar que a expansão assintótica do erro global

$$\eta(t, \Delta t) = \bar{y}(t) + \Delta t^p e_p(t) + \Delta t^{p+1} e_{p+1}(t) + \cdots + \Delta t^N e_N(t) + \Delta t^{p+N} E_{N+1}(t, \Delta t)\,,$$

onde os coeficientes $e_k(t_0) = 0$, $k = p, p+1, \ldots$, vale para todo $t \in [t_0, t_{\rm f}]$ e todo $\Delta t = (t - t_0)/n$, $n = 1, 2, \ldots$ Além disso, os coeficientes $e_k(t)$ não dependem de Δt e o resto $E_{N+1}(t, \Delta t)$ é limitado para cada t fixado e para todo $\Delta t = (t - t_0)/n$, $n = 1, 2, \ldots$ Ver-se-á, a seguir, como este resultado pode ser usado para validar implementações computacionais e para estimar o erro global $\eta(t, \Delta t)$.

3 Validação de códigos e estimativas de erros

Antes de utilizar um programa para resolver o problema de interesse é necessário saber se, de fato, o que está implementado é o que se desejava implementar. Para isto, usa-se uma técnica de validação à qual mais e mais se tem referido por *validação com solução manufaturada*.

Para ilustrar a idéia, considere o Problema de Cauchy do Exemplo 5, acima, e o resultado assintótico associado a ele para um método implementado de ordem p. Escolha qualquer função $y_e(t)$ suficientemente regular (não é necessário que ela seja $C^{+\infty}$ mas que tenha pelo menos $p+1$ derivadas). Deseja-se "manufaturar" um problema para o qual $y_e(t)$ seja a solução exata. Para isto, considere o Problema de Cauchy

$$y'(t) = f(t, y) \doteq y_e'(t)\,,$$

com condição inicial dada por $y(t_0) = y_e(t_0)$. Claro, verifique, $y_e(t)$ é a solução deste problema!

A seguir, para um instante arbitrário escolhido e fixado $\bar{t}$, em malhas de integração progressivamente mais finas cujos passos de integração são dados respectivamente por $\Delta t_k = (\bar{t} - t_0)/2^k$, $k = 1, 2, ...$, obtêm-se as soluções numéricas $\eta_k(\bar{t}) \doteq \eta(\bar{t}, \Delta t_k)$. Para passos de integração suficientemente pequenos, em primeira aproximação, tem-se

$$\eta_k(\bar{t}) - y_e(\bar{t}) \approx \Delta t_k^p e_p(\bar{t})\,, \quad k\text{=1,2,...}$$

tomando-se por base a expansão assintótica do erro global de discretização. Como o coeficiente e_p depende apenas de $\bar{t}$ (e não de Δt_k), para dois índices consecutivos $k = q$ e $k = q + 1$, tem-se que a razão dos valores absolutos dos erros é dada por

$$\frac{|\eta_q(\bar{t}) - y_e(\bar{t})|}{|\eta_{q+1}(\bar{t}) - y_e(\bar{t})|} \approx \frac{\Delta t_q^p}{\Delta t_{q+1}^p}\,\frac{|e_p(\bar{t})|}{|e_p(\bar{t})|} = 2^p\,.$$

Claro, espera-se que, à medida que Δt_k tende a zero (ou, equivalentemente, à medida que k tende a infinito), o resultado acima represente cada vez melhor a realidade. Assim, resolvendo-se o mesmo problema com solução manufaturada diversas vezes, em malhas progressivamente mais finas, espera-se obter uma seqüência de razões que tende a 2^p, onde p é a ordem "teórica", prevista para o método implementado. Qualquer falha na codificação ou na atribuição das condição inicial, resultará no fracasso deste teste. Como "o seguro morreu de velho", o procedimento descrito é repetido diversas vezes para funções diferentes com regularidade suficiente).

Uma vez tendo sido validada a contento a implementação do esquema numérico de interesse, é possível usar a mesma expansão assintótica para estimar o erro global cometido quando o método é empregado para resolver um problema de interesse. Veja, desta vez, não se conhece (claro!) $\bar{y}(t)$, a solução exata do problema mas sabe-se que o método a ser empregado tem ordem p e está corretamente implementado. Uma vez mais, para Δt_k "suficientemente pequeno", tem-se em primeira aproximação

$$\eta_k(t) - \bar{y}(t) \approx \Delta t_k^p e_p(t)$$

assim como

$$\eta_{k+1}(t) - \bar{y}(t) \approx \Delta t_{k+1}^p e_p(t)\,,$$

para cada t fixado. Subtraindo-se uma da outra, das expressões anteriores, chega-se a uma estimativa do coeficiente $e_p(t)$ dada por

$$e_p(t) \approx \frac{\eta_{k+1}(t) - \eta_k(t)}{\Delta t_{k+1}^p - \Delta t_k^p}\,.$$

Com esta estimativa, é possível avaliar o erro global de discretização cometido no instante t, o qual é dado por, por exemplo,

$$\eta_{k+1}(t) - \bar{y}(t) \approx \Delta t_{k+1}^p e_p(t)\,.$$

Desta forma, é possível julgar se o passo de integração está de tamanho adequado ou não para o que se tem como objetivo a ser atingido como erro cometido na aproximação numérica: se o erro estiver muito grande, diminui-se o passo de integração; por outro lado, se o erro estiver muito pequeno, para tornar os cálculos mais eficientes, aumenta-se o passo de integração (este procedimento é conhecido como *controle de passo* e pode (e deve) ser automatizado durante uma simulação numérica).

Referências

[1] A. F. P. C. Humes, I. S. H. Melo, L. K. Yoshida, Noções Básicas de Cálculo Numérico, IME-USP, 1983.

[2] E. J. Hinch, Perturbation Methods, Cambridge University Press, 1992.

[3] J. Stoer, R. Bulirsch, Introduction to Numerical Analysis, Springer-Verlag New York Inc., 1989.