Expansões Assintóticas, Validação de Códigos e Estimativas de Erros

Alexandre Megiorin Roma

Universidade de São Paulo
MAP / IME-USP

São Paulo, 17 de Outubro de 2008.

$f(x) = O(g(x))$, para $x \to +\infty$ 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 uma vizinhança de um ponto a,

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

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

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

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

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

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 $|x - x_0| < \delta \Rightarrow |d^k f(x_0)/dx^k| \leq C$, para $k = 1, 2$ e 3), então

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

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

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

O número total de operações aritméticas envolvidas no processo de resolução de um sistema linear pelo Método de Eliminação de Gauss é

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

onde n é a ordem da matriz. Vê-se que $T(n) = O(n^3)$ 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.

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, resultando num expansão (ou série) assintótica de potências

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

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

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

Conclusão: *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. Exemplo Surpreendente.

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

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{-t^{2n}}{n!}\, dt =$$

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

A série de $f(z)$ converge para todo o valor de z. O número de termos necessários para aproximar $f(z)$ com precisão de 10^{-5}:

1. $z = 1$, 08 termos.
2. $z = 2$, 16 termos...
3. $z = 3$, 31 termos!
4. $z = 5$, 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

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

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

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

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 !!!

Ao contrário do que se pode pensar, somas finitas obtidas a partir deste procedimento são extremamente úteis. O número de termos necessários para aproximar $f(z)$ com precisão de 10^{-5}:

1. $z = 2.5$, 03 termos!
2. $z \geq 3$, 02 termos!!!

Para "enquadrar" o exemplo anterior no contexto de representação assintótica basta "enxergar" o pequeno parâmetro ϵ como sendo z^{-1} (claro, para z "grande").

Conclusão.

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.

Problema de Cauchy: $y'(t) = f(t, y(t))$, $y(t_0) = y_0$. 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"sobre a função $f(t, y)$, então é possível mostrar que a expansão assintótica do erro global [1]

$$\eta(t, \Delta t) = \bar{y}(t) + \Delta t^p e_p(t) +$$

$$+\Delta t^{p+1} e_{p+1}(t) + \cdots + \Delta t^N e_N(t) + \Delta t^{p+N} E_{N+1}(t, \Delta t)\,,$$

onde os coeficientes $e_k(t_0) = 0$, $k = p, p+1$, ..., vale para todo $t \in [t_0, t_f]$ e todo $\Delta t = (t - t_0)/n$, $n = 1, 2$, ... 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 $\Delta t = (t - t_0)/n$, $n = 1, 2$, ...

validação com solução manufaturada: escolha qualquer função $y_e(t)$ suficientemente regular e considere o Problema de Cauchy

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

com $y(t_0) = y_e(t_0)$.

Para um instante arbitrário fixado $\bar{t}$, em malhas de integração progressivamente mais finas $\Delta t_k = (\bar{t} - t_0)/2^k$, $k = 1, 2, ...$, obtenha

$$\eta_k(\bar{t}) \doteq \eta(\bar{t}, \Delta t_k).$$

Para passos de integração suficientemente pequenos, em primeira aproximação, tem-se

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

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

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

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,

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

Referências

- J. Stoer and R. Bulirsch: *Introduction to Numerical Analysis*. Springer-Verlag New York Inc., 1989.
- E.J. Hinch: *Perturbation Methods*. Cambridge University Press, 1992.