Capítulo 3.

O ESTIMADOR EMPÍRICO

Com base no comportamento apresentado pelo erro de iteração, é introduzido neste capítulo um novo estimador de erro: o estimador *empírico*. Para tanto, inicialmente são apresentadas as características do erro iterativo e as definições de ordem assintótica e efetiva. Em seguida discute-se sobre a estimativa do erro de iteração, onde são apresentados o conceito e expressões para o cálculo da ordem aparente da incerteza de soluções numéricas e a formulação do estimador.

3.1 CARACTERÍSTICAS DO ERRO DE ITERAÇÃO

Para exemplificar o efeito dos erros de iteração sobre o erro da solução numérica, considere-se o uso do método da iteração linear (MIL) (Barroso, 1987) na resolução da equação

$$x^2 - 5x + 6 = 0 \tag{3.1}$$

A solução numérica iterativa da Eq. (3.1) é tratada detalhadamente no capítulo 4. Este exemplo mostra a característica principal dos erros de iteração quando se aumenta o número de iterações: em geral, seu valor diminui em escala logarítmica e tende a uma inclinação constante. Isso pode ser observado na Fig. 3.1.

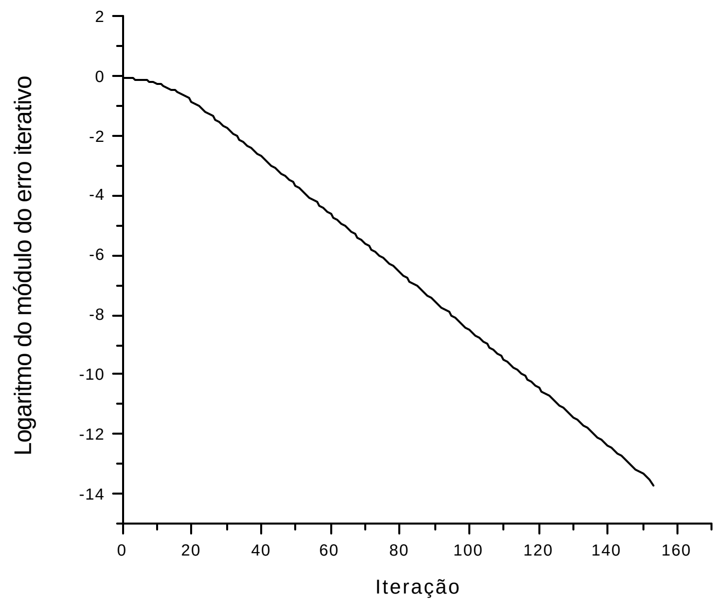

Figura 3.1 – Erro da solução numérica da Eq. (3.1), causado pelos erros de iteração.

Com base no fato de que o erro de iteração ($E(f_n)$) apresenta comportamento exponencial (Roy e Blottner, 2001), conforme ilustrado na Fig. 3.1, na base decimal, tem-se:

$$E(f_n) = C\,10^{-np_L} \tag{3.2}$$

onde p_L é a ordem assintótica do erro, ou seja, é a inclinação assintótica para a qual tende a curva do erro iterativo quando $n \to \infty$. Quanto maior é esta inclinação, maior é o valor da ordem e maior é a taxa de redução de $E(f_n)$ com o aumento de *n*. E ainda, para um mesmo número de iterações, menor é o erro.

Roy e Blottner (2001) consideram, por simplificação, que para $n \to \infty$, isto é, para um número infinito de iterações, o valor do coeficiente C na Eq. (3.2) é constante. Porém, para um caso prático qualquer, deve-se admitir que a forma geral do erro de iteração é dada pela Eq. (2.20). No entanto, quando o número de iterações (*n*) é muito grande, o primeiro termo desta expressão é o principal componente, já que m_1 é o autovalor dominante da matriz iterativa, ou seja, o autovalor de maior magnitude (Ferziger e Peric, 1996). Isso possibilita uma aproximação para expressão geral do erro formada por um único termo.

3.1.1 Ordem efetiva

A ordem efetiva (p_E) do erro de iteração é definida como a inclinação local da curva de $E(f_n)$ *versus* n num gráfico logarítmico. Matematicamente, a ordem efetiva (p_E) é obtida a partir da Eq. (3.2), onde C é admitido ser independente de n. Considerando-se duas iterações n_1 e n_2, com $n_1 < n_2$, tem-se:

$$\begin{cases} E(f_{n_1}) = C\,10^{-n_1 p_E} \\ E(f_{n_2}) = C\,10^{-n_2 p_E} \end{cases} \tag{3.3}$$

Do sistema (3.3), tem-se que:

$$p_E = \frac{\log\left[\dfrac{E(f_{n_1})}{E(f_{n_2})}\right]}{n_2 - n_1} \tag{3.4}$$

3.2 ESTIMATIVA DO ERRO DE ITERAÇÃO

Pela Eq. (1.2), o valor do erro de iteração só pode ser calculado quando se conhece a solução exata do sistema de equações resultante da discretização. Mas em termos práticos isso não é possível. Conseqüentemente é necessário estimar qual é o valor da solução exata. A solução exata para o sistema de equações não é a solução analítica para a equação que rege o problema, pois o sistema é produto da discretização, ou seja, aproximações.

A incerteza iterativa ($U(f_n)$) de uma solução numérica é calculada pela diferença entre a solução exata estimada (f_∞) para a variável de interesse e a sua solução numérica em uma iteração n (f_n):

$$U(f_n) = f_\infty - f_n \tag{3.5}$$

Com base na Eq. (3.2), admite-se que

$$U(f_n) = k\,10^{-n p_U} \tag{3.6}$$

com k sendo constante e p_U indicando a ordem aparente, cujo valor explícito pode ser obtido pela Eq. (3.9).

3.2.1 Ordem aparente

A ordem aparente (p_U) é definida como a inclinação local da curva de incerteza (U_n) da solução numérica (f_n) *versus* o número de iterações (n) num gráfico logarítmico. O valor para o qual as ordens efetiva e aparente tendem, quando se aumenta o número de iterações, é a *ordem assintótica* do erro iterativo (p_L). Ela não é um resultado conhecido *a priori*, ou seja, é obtida somente através de experimentos numéricos.

Considerando-se as iterações n_1, n_2 e n_3, com $n_1 < n_2 < n_3$, e as Eqs. (3.5) e (3.6), podemos escrever:

$$\begin{cases} f_\infty - f_{n_1} = k\,10^{-n_1 p_U} \\ f_\infty - f_{n_2} = k\,10^{-n_2 p_U} \\ f_\infty - f_{n_3} = k\,10^{-n_3 p_U} \end{cases} \tag{3.7}$$

Supondo que:

$$\Delta n = n_2 - n_1 = n_3 - n_2 \tag{3.8}$$

Do sistema de equações (3.7), tem-se:

$$p_U = \frac{\log(y)}{\Delta n} \tag{3.9}$$

onde:

$$y = \frac{f_{n_2} - f_{n_1}}{f_{n_3} - f_{n_2}} \tag{3.10}$$

3.2.2 Dedução do estimador *empírico*

Do sistema de equações (3.7), tem-se que:

$$f_\infty = f_{n_3} + \frac{(f_{n_3} - f_{n_2})}{(y - 1)} \tag{3.11}$$

Substituindo este resultado na Eq. (3.5):

$$U(f_{n_3}) = \frac{(f_{n_3} - f_{n_2})}{(y - 1)} \tag{3.12}$$

Sendo esta a expressão fornecida para a estimativa do erro de iteração na iteração n_3, através do estimador *empírico*. Marchi e Silva (2002) demonstraram que estimativas de erro baseadas em equações semelhantes à Eq. (3.6) ou (3.12) são válidas apenas para $y > 1$ ou $p_U > 0$. Quando a ordem aparente (p_U) apresenta valores negativos a utilização do estimador *empírico* não faz sentido, pois o princípio deste estimador está no comportamento exponencial apresentado pelo erro de iteração, Eq. (3.6), e ao se considerar $p_U < 0$, a magnitude da estimativa do erro aumenta com o número de iterações. Isto é, este estimador é válido apenas para valores das ordens assintótica (p_L) e aparente (p_U) maiores do que zero, ou seja, (p_L, p_U) > 0. O argumento para justificar o uso de ordens positivas é o seguinte: considere-se $p_U < 0$ sobre a Eq. (3.6), isto implica que

$$U(f_n) = k\,10^{n|p_U|} \tag{3.13}$$

A partir da Eq. (3.13), verifica-se que ao se aumentar o número de iterações (n), a incerteza aumenta. Este resultado é oposto ao esperado para o comportamento do erro de iteração.

Ao se considerar k como sendo um coeficiente constante na Eq. (3.6), ou seja, independente de n, tem-se algumas implicações, pois k desempenha o mesmo papel de C na Eq. (3.2). Este fato faz com que na maioria das aplicações, a incerteza obtida através desta estimativa seja diferente do erro de iteração; o quão diferente vai depender da complexidade de cada problema e do número de iterações (n) a ser utilizada.

3.3 O ESTIMADOR EMPÍRICO E O ESTIMADOR *FP*

Para os casos em que A possui autovalor dominante real, tem-se algumas relações entre este estimador e o estimador de Ferziger e Peric (*FP*), apresentado na seção 2.3.2. Pelo estimador *FP*, para autovalor dominante real e iterações n_1, n_2 e n_3, com $n_1 < n_2 < n_3$, tem-se:

$$U(f_{n_2}) = \frac{(f_{n_2} - f_{n_3})}{(m_{1,n_2} - 1)} \tag{3.14}$$

onde, m_{1,n_2} indica o autovalor dominante para matriz iterativa A na iteração n_2, que é dado por:

$$m_{1,n_2} = \left| \frac{(f_{n_3} - f_{n_2})}{(f_{n_2} - f_{n_1})} \right| \tag{3.15}$$

Comparando as Eqs. (3.15) e (3.10), pode-se concluir que:

$$y_{n_3} = \frac{1}{m_{1,n_2}} \tag{3.16}$$

Ou seja, o parâmetro y, adotado na formulação do estimador *empírico*, é o inverso do autovalor dominante (m_1) considerado por Ferziger e Peric (1996) no cálculo da estimativa do erro de iteração; no entanto, não considerados em uma mesma iteração. Isto é, como estes parâmetros são atualizados a cada iteração, y é o inverso de m_1 em uma iteração anterior.

3.4 O ESTIMADOR EMPÍRICO E O ESTIMADOR DELTA

Para as iterações n_2 e n_3, com $n_2 < n_3$, a variação do erro (ΔE) pode ser analisada através do valor absoluto da diferença entre os erros em cada iteração (Roache, 1982):

$$\Delta E = \left| E(f_{n_3}) - E(f_{n_2}) \right| \tag{3.17}$$

Conforme definido no capítulo 1, Eq. (1.2), o erro iterativo é dado pela diferença entre a solução exata (Φ) e a solução numérica na iteração corrente (f_n). Portanto, a Eq. (3.17) pode ser reescrita por

$$\Delta E = \left|(\Phi - f_{n_3}) - (\Phi - f_{n_2})\right| \tag{3.18}$$

o que resulta em

$$\Delta E = \left|f_{n_2} - f_{n_3}\right| \tag{3.19}$$

Portanto, analisar a variação do erro é equivalente a se analisar a variação da solução numérica nas respectivas iterações. Então, a incerteza calculada através do estimador *Delta*, Eq. (2.14), está diretamente relacionada à variação do erro entre duas iterações.

O cálculo da incerteza numérica utilizando o estimador *Delta* (U_Δ) usa soluções numéricas obtidas em duas iterações, não levando em conta a razão de convergência (y) envolvida na formulação do estimador *empírico*. Uma relação facilmente verificável é que a magnitude do estimador *empírico* coincide com o resultado do estimador *Delta* para o caso em que $y = 2$, ou seja:

$$\left|U(f_{n_3})\right| = \left|\frac{f_{n_3} - f_{n_2}}{y - 1}\right| = \left|\frac{f_{n_3} - f_{n_2}}{2 - 1}\right| = \left|f_{n_3} - f_{n_2}\right| \tag{3.20}$$

3.5 O ESTIMADOR EMPÍRICO E O ESTIMADOR *RB*

Na seção 2.3.4 foi apresentado o estimador de Roy e Blottner (*RB*). Considerando-se $n_1 < n_2 < n_3$, a incerteza de iteração na iteração n_2, ($U(f_{n_2})$), obtida através do estimador *RB* é dada por:

$$U(f_{n_2}) = -\frac{f_{n_3} - f_{n_2}}{1 - v_{n_2}} = \frac{f_{n_3} - f_{n_2}}{v_{n_2} - 1} \tag{3.21}$$

onde:

$$\nu_{n_2} = \frac{f_{n_3} - f_{n_2}}{f_{n_2} - f_{n_1}} \qquad (3.22)$$

Para se obter uma estimativa de erro utilizando-se o estimador *RB*, necessita-se da solução numérica da variável de interesse em três iterações sucessivas. Sendo que, somente é possível obter a incerteza na iteração intermediária, ou seja, obtém-se $U(f_{n_2})$ a partir dos resultados de f_{n_1}, f_{n_2} e f_{n_3}.

Através do estimador *empírico* a estimativa do erro, dada pela Eq. (3.12), também necessita da solução numérica da variável de interesse em três iterações sucessivas. Portanto, $U(f_{n_2})$ através do estimador *RB* é equivalente a $U(f_{n_3})$ pelo estimador *empírico*, a menos dos parâmetros envolvidos: ν e y.

Com relação a ν e y, comparando as equações (3.10) e (3.22), pode-se concluir que:

$$y_{n_3} = \frac{1}{\nu_{n_2}} \qquad (3.23)$$

Ou seja, o parâmetro y, adotado na formulação do estimador *empírico*, é o inverso de ν considerado por Roy e Blottner no cálculo da estimativa do erro de iteração; no entanto, não considerados em uma mesma iteração. Isto é, como estes parâmetros são atualizados a cada iteração, y é o inverso de ν em uma iteração anterior.

3.6 PREVISÃO DA CONFIABILIDADE DO RESULTADO OBTIDO PELO ESTIMADOR DE ERRO

Propõe-se, aqui, prever as características da estimativa de erro na iteração n_3 através dos resultados numéricos de $f_{n_1}, f_{n_2}, f_{n_3}, f_{n_4}$ e pela solução extrapolada f_{p_U}, onde:

$$f_{p_U} = \frac{(f_{n_3} - f_{n_2})}{y} + f_{n_3} \tag{3.24}$$

$$y = \frac{f_{n_2} - f_{n_1}}{f_{n_3} - f_{n_2}} \tag{3.25}$$

com $n_1 < n_2 < n_3 < n_4$.

A principal hipótese adotada é que o comportamento de f_{n_4} com relação a f_{p_U} se repete a cada nova extrapolação até o limite de $n \to \infty$, onde n representa o número de iterações. São considerados três intervalos:

3.6.1 Intervalo I

Conforme a Fig. 3.2, se a solução numérica f_{n_4} estiver entre a solução numérica f_{n_3} e a solução extrapolada f_{p_U}, então espera-se que a estimativa de erro na iteração n_3 seja confiável, isto é,

$$\left(\frac{f_{p_U} - f_{n_3}}{f_{n_4} - f_{n_3}}\right) > 1 \;\Rightarrow\; \frac{U(f_{n_3})}{E(f_{n_3})} > 1 \tag{3.26}$$

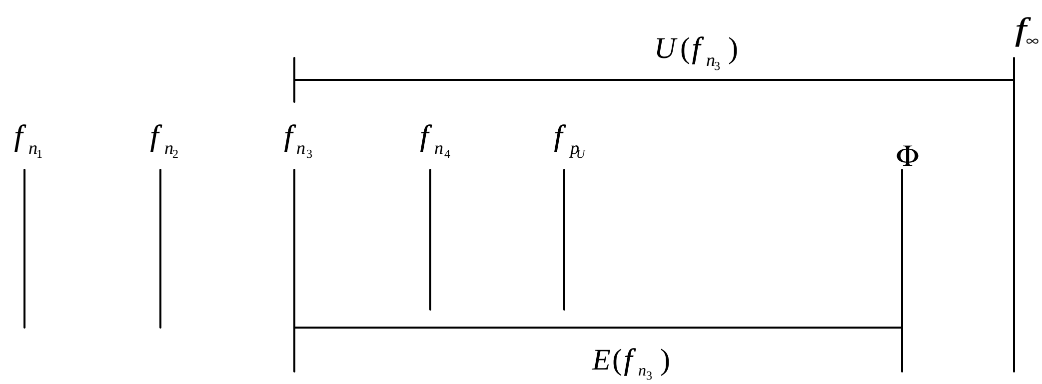

Figura 3.2 Comportamento de f_{n_4} com relação a f_{p_U} para o Intervalo I.

3.6.2 Intervalo II

Conforme a Fig. 3.3, se a solução extrapolada f_{p_U} estiver entre a solução numérica f_{n_3} e a solução numérica f_{n_4}, então espera-se que a estimativa de erro na iteração n_3 não seja confiável, isto é,

$$0 < \left(\frac{f_{p_U} - f_{n_3}}{f_{n_4} - f_{n_3}} \right) < 1 \;\Rightarrow\; 0 < \frac{U(f_{n_3})}{E(f_{n_3})} < 1 \tag{3.27}$$

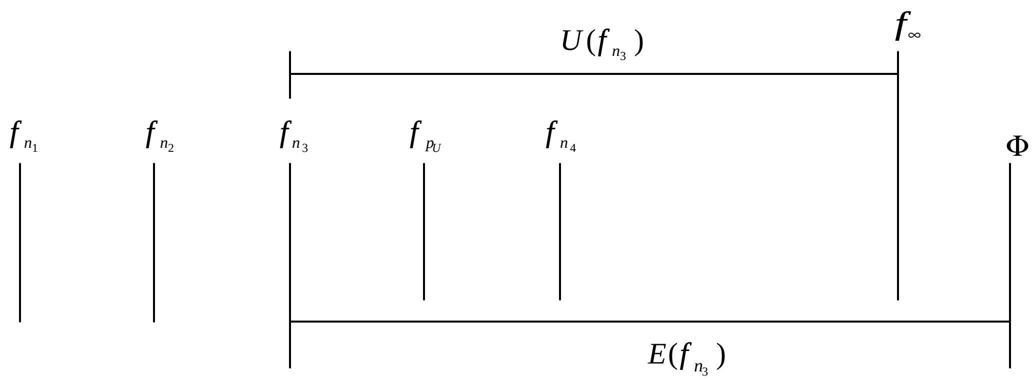

Figura 3.3 Comportamento de f_{n_4} com relação a f_{p_U} para o Intervalo II.

3.6.3 Intervalo III

Conforme Fig. 3.4, se a solução numérica f_{n_3} estiver entre a solução numérica f_{n_4} e a solução extrapolada f_{p_U}, então espera-se que a estimativa de erro na iteração n_3 tenha sinal oposto ao erro; constitui-se na pior previsão de erro:

$$\left(\frac{f_{p_U} - f_{n_3}}{f_{n_4} - f_{n_3}} \right) < 0 \;\Rightarrow\; \frac{U(f_{n_3})}{E(f_{n_3})} < 0 \tag{3.28}$$

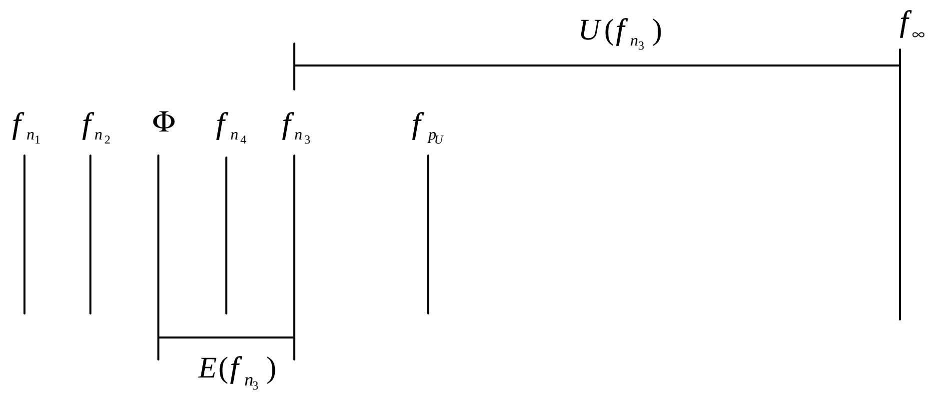

Figura 3.4 Comportamento de f_{n_4} com relação a f_{p_U} para o Intervalo III.

Este método de previsão (intervalos I a III) só pode ser aplicado se a razão de convergência (y) for maior do que 1, o que implica no fato de (p_U) existir e assumir valores positivos. A análise dos resultados ao se aplicar este método é feita através de um gráfico de confiabilidade (Fig. 3.5), utilizando-se os seguintes critérios:

- 0 $\Rightarrow$ o método não se aplica (p_U não existe ou $p_U < 0$).
- 1 $\Rightarrow$ o método se aplica e sua previsão é correta, conforme os intervalos I, II e III.
- -1 $\Rightarrow$ o método se aplica e sua previsão é incorreta.

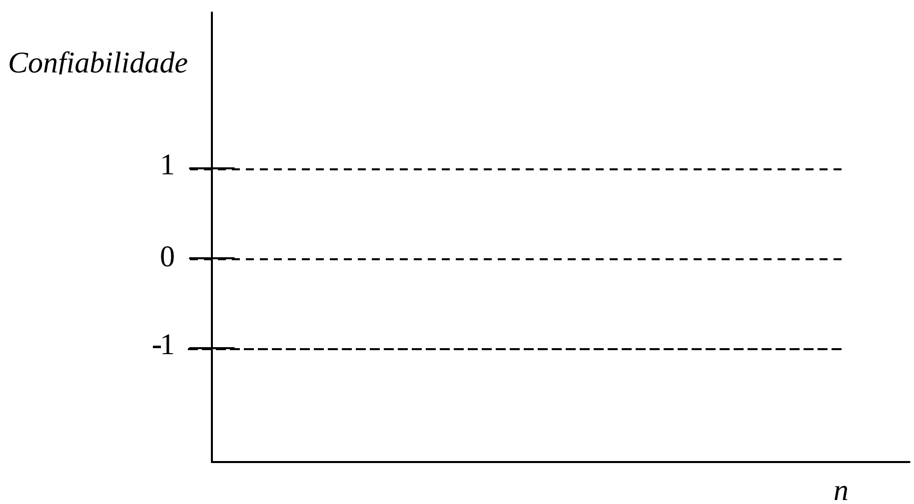

Figura 3.5 Gráfico de confiabilidade do método de previsão.

Aplicações de gráficos de confiabilidade são apresentadas nos próximos capítulos.

3.7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Conforme visto neste capítulo, existem relações diretas entre os estimadores de erro de iteração *empírico*, *delta*, *Ferziger e Peric*, e *Roy e Blotner*. Portanto, as análises feitas neste trabalho se concentram apenas no estimador *empírico*.