

CAPITULO 4

SISTEMAS DE EQUAÇÕES NÃO LINEARES

4.1. INTRODUÇÃO

O capítulo anterior se iniciou com uma discussão sobre a modelagem matemática de sistemas físicos que permitisse sua análise, concepção e até mesmo projeto. Foi então apresentada uma forma de viabilizar a obtenção da solução aproximada das equações matemáticas que modelam o comportamento físico do sistema, para obter sua resposta no tempo e/ou espaço. Para tanto, é feita a aproximação do sistema real contínuo por um sistema aproximado discreto, criando assim um conjunto de equações matemáticas, uma para cada ponto do sistema discreto (malha) que por sua vez aproxima o sistema contínuo.

A classe de problemas tratados no capítulo 3 engloba sistemas físicos que apresentam comportamento linear, portanto, podendo ser representados por um modelo matemático de equações lineares. Foram então apresentados métodos para a solução de sistemas de equações lineares.

Na realidade, constata-se que a maioria dos sistemas físicos apresenta comportamento não linear. Esses sistemas não podem ser adequadamente modelados matematicamente por sistemas de equações lineares. As leis físicas que regem seu comportamento levam à formulação de sistemas de equações matemáticas não lineares. Para prever a resposta desses sistemas, é necessário o desenvolvimento de métodos numéricos para a solução dessas equações não lineares simultaneamente.

Neste capítulo são apresentados e discutidos vários métodos numéricos de solução de sistemas de equações não lineares. A discussão é contextualizada com o uso de exemplos de sistemas físicos reais e os modelos matemáticos correspondentes.

4.2. O PROBLEMA

O problema é formulado de forma geral pela seguinte equação vetorial:

$$\bar{g}(\bar{u}) = 0 \quad (4.1)$$

onde $\bar{g} = (g_1, g_2, \dots, g_n)^T$ é um homeomorfismo suficientemente suave de $\mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}^n$.

Um homeomorfismo é uma bijeção ($1 \leftrightarrow 1$), com tanto \bar{g} como o mapeamento inverso \bar{g}^{-1} contínuos.

Fisicamente, um homeomorfismo significa que o processo modelado por \bar{g} tem uma solução única \bar{u} para qualquer conjunto de condições de entrada \bar{y} , i.e., $\bar{g}(\bar{x}) = \bar{y}$, e que a solução \bar{x} varia continuamente com a entrada \bar{y} . Refere-se a esta noção como um processo **bem posto** \bar{g} .

4.3. O MÉTODO DE ITERAÇÃO FUNCIONAL

Analogamente ao problema unidimensional apresentado na Seção 2.5 deste livro, desenvolve-se agora um processo iterativo para gerar uma sequência de vetores que

idealmente convergiria para o vetor solução do problema formulado pela Eq. (4.1), conforme se segue:

$$\vec{g}(\vec{u}) = 0 \quad (4.1)$$

$$\vec{u} = \vec{u} - \vec{g}(\vec{u}) = \vec{G}(\vec{u}) \quad (4.2)$$

Portanto, sugere-se a relação de recorrência:

$$\vec{u}_{k+1} = \vec{G}(\vec{u}_k) \quad (4.3)$$

É possível ser demonstrado que a condição de convergência para o processo iterativo da Eq. (4.3) é que $\vec{G}(\vec{u})$ seja um mapeamento contrativo (Exercício 4.1), uma vez que se trata de uma iteração de ponto fixo (vide Capítulo 2).

Um comentário baseado na observação prática é que o método é bastante simples algebricamente, porém a condição de convergência normalmente é difícil de ser satisfeita, i.e., que a função vetorial $\vec{G}(\vec{u})$ construída a partir da explicitação do vetor \vec{u} na Eq. (4.1) seja um mapeamento contrativo. Note que a forma de explicitação do vetor \vec{u} apresentada na Eq. (4.2) é apenas uma das possíveis alternativas para tal. Na verdade, a partir das equações algébricas que formulam o sistema, podem ser obtidas muitas outras formas para $\vec{G}(\vec{u})$.

O método pode ser melhorado utilizando a seguinte formulação alternativa:

$$\vec{u}_{k+1} = \vec{G}(\vec{u}_k) = \vec{u}_k - \alpha_k A(\vec{u}_k) \vec{g}(\vec{u}_k) = \vec{u}_k - \alpha_k \vec{d}(\vec{u}_k) \quad (4.4)$$

onde α_k é uma constante não nula que pode variar a cada iteração k e $A(\vec{u}_k)$ é uma matriz não singular que depende de \vec{u}_k . O produto $A(\vec{u}_k) \vec{g}(\vec{u}_k)$ define o assim chamado vetor de correção. Esse método cria uma forma recursiva de buscar a solução de $\vec{g}(\vec{u}) = 0$. Note que $A(\vec{u}_k) \vec{g}(\vec{u}_k) = 0$ se e somente se $\vec{g}(\vec{u}) = 0$.

A fórmula básica de iteração apresentada na Eq. (4.4) define uma grande variedade de métodos para a solução de sistemas de equações não lineares. No entanto, a maior dificuldade com esses métodos iterativos reside na escolha da matriz A , que produza vetores de correção eficazes que levem a obter a solução \vec{u} .

Neste capítulo são apresentados e discutidos métodos que se enquadram na definição matemática da Eq. (4.4).

4.4. O MÉTODO DE PICARD

É possível derivar um método bastante simples a partir do problema de ponto fixo, que é denominado de substituição sucessiva ou Picard. Para tanto, reescreve-se a Eq. (4.1) que representa o resíduo do sistema de equações em análise, conforme se segue:

$$\vec{g}(\vec{u}) = \vec{u} - \vec{h}(\vec{u}) = 0 \quad (4.5)$$

A Equação ((4.5) sugere o seguinte processo iterativo:

$$\vec{u}_{k+1} = \vec{h}(\vec{u}_k) \quad (4.6)$$

Observa-se na prática que esse algoritmo tem um raio de convergência grande. Aqui define-se raio de convergência como a distância entre o vetor inicial estimado para o vetor solução. No entanto, a velocidade (ou taxa) de convergência é geralmente baixa. Portanto, é interessante buscar formas de melhorar a taxa de convergência, e uma delas é obtida pela seguinte fórmula de relaxação:

$$\bar{u}_{\text{int}} = h(\bar{u}_k) \quad (4.7)$$

onde \bar{u}_{int} é um vetor intermediário obtido como estimativa para a iteração $k + 1$. O valor usado de fato para \bar{u}_{k+1} é obtido por homotopia usando um parâmetro α , tal que $0 \leq \alpha < 1$, conforme se segue:

$$\bar{u}_{k+1} = \alpha \bar{u}_k + (1 - \alpha) \bar{u}_{\text{int}} \quad (4.8)$$

Verifica-se que problemas não lineares freqüentemente exibem um comportamento oscilatório de convergência. Nesses casos, o uso da Eq. (4.8) pode trazer grandes benefícios.

O método de Picard normalmente é utilizado nas iterações iniciais de uma estratégia geral de solução de sistemas de equações não lineares, para viabilizar a convergência de métodos mais rápidos, como por exemplo, o método de Newton que será abordado ainda neste Capítulo. Isto se deve ao fato de que o método apresenta um raio de convergência bastante grande, porém tem baixa taxa de convergência, daí o interesse de combinar o método com métodos mais rápidos que tenham raio de convergência baixo.

Exemplo 4.1) Resolva o sistema $\vec{g}(\vec{u}) = 0$ abaixo numericamente pelo método de Picard utilizando uma fórmula de relaxação apropriada, considerando uma tolerância $\|\vec{g}\| \leq 10^{-6}$. Ache o vetor solução $\vec{u}^T = (u_1, u_2, u_3)$, usando o vetor de valores iniciais $\vec{u}_0^T = (1, 1, 1)$.

$$\begin{cases} g_1 = u_1^3 + 2u_2^2 - u_3 - 20 = 0 \\ g_2 = 2u_1 - u_1u_2 + u_3 - 2 = 0 \\ g_3 = u_1 + u_2 - u_3 - 5 = 0 \end{cases}$$

Solução

Inicialmente, reescreve-se o sistema na forma sugerida pela Eq. (4.6), conforme se segue:

$$\begin{cases} u_1 = h_1 = (20 - 2u_2^2 + u_3)^{1/3} \\ u_2 = h_2 = (2u_1 + u_3 - 2)/u_1 \\ u_3 = h_3 = u_1 + u_2 - 5 \end{cases}$$

Assim, a fórmula de iteração de Picard com relaxação é dada por

$$\bar{u}_{\text{int}} = h(\bar{u}_k) \text{ e } \bar{u}_{k+1} = \alpha \bar{u}_k + (1 - \alpha) \bar{u}_{\text{int}}$$

Utilizando $\alpha = 0,1$ e um programa computacional (DVD em anexo ao livro), obtém-se o seguinte histórico de convergência:

Método de Picard

```

gnorm= 18.439090
----- i = 1
u( 1)= 2.501562
u( 2)= 1.000000
u( 3)= -2.600000
gnorm= 2.383600
----- i = 2
u( 1)= 2.489304
u( 2)= 2.450338E-01
u( 3)= -1.608595
gnorm= 3.018147
----- i = 3
u( 1)= 2.619390
u( 2)= 5.198275E-01
u( 3)= -2.199955
gnorm= 8.526345E-01
:
:
:
----- i = 27
u( 1)= 2.601151
u( 2)= 5.017949E-01
u( 3)= -1.897056
gnorm= 4.869294E-06
----- i = 28
u( 1)= 2.601151
u( 2)= 5.017956E-01
u( 3)= -1.897054
gnorm= 1.330028E-06
----- i = 29
u( 1)= 2.601151
u( 2)= 5.017960E-01
u( 3)= -1.897054
gnorm= 9.020014E-07
converged in 29 iterations
-----

```

4.5. O MÉTODO DE NEWTON

Um método que apresenta uma taxa de convergência bastante melhor do que o método de Picard é o método de Newton. Conforme discutido no Capítulo 2, para uma equação não linear, o método de Newton apresenta convergência de segunda ordem, i.e., $O(e_i^2)$, onde e_i é o erro na iteração “i”. O fato é que se observa a mesma taxa de convergência quando o método é aplicado a sistemas de equações não lineares (Exercício 4.2).

Deriva-se o método de Newton a partir do sistema de equações representado de forma compacta por:

$$\bar{g}(\bar{u}) = 0 \quad (4.1)$$

Uma expansão em série de Taylor ao redor de um ponto arbitrário \bar{u}_0 próximo à raiz \bar{u} estabelece que:

$$\bar{g}(\bar{u}) = \bar{g}(\bar{u}_0) + \frac{\partial \bar{g}(\bar{u}_0)}{\partial u_1} (u_1 - u_{10}) + \frac{\partial \bar{g}(\bar{u}_0)}{\partial u_2} (u_2 - u_{20}) + \dots + \frac{\partial \bar{g}(\bar{u}_0)}{\partial u_n} (u_n - u_{n0}) \cong 0 \quad (4.9)$$

onde $\bar{u}_0 = (u_{10}, u_{20}, \dots, u_{n0})$, $\bar{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)$, $\bar{g} = (g_1, g_2, \dots, g_n)$ e n é o número de equações do sistema a ser resolvido. Além disso, a série foi truncada na primeira derivada.

A Equação (4.9), que é vetorial, determina um sistema de equações algébricas lineares a ser resolvido para o vetor diferença $\bar{w} = (\bar{u} - \bar{u}_0)$. Isto é melhor visualizado na matriz a seguir, construída a partir da Eq. (4.9):

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial g_1(\bar{u}_0)}{\partial u_1} & \dots & \frac{\partial g_1(\bar{u}_0)}{\partial u_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_n(\bar{u}_0)}{\partial u_1} & \dots & \frac{\partial g_n(\bar{u}_0)}{\partial u_n} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} u_1 - u_{10} \\ \vdots \\ u_n - u_{n0} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -g_1(\bar{u}_0) \\ \vdots \\ -g_n(\bar{u}_0) \end{vmatrix} \quad (4.10)$$

A Equação (4.10) sugere o seguinte processo iterativo:

$$\frac{\partial \bar{g}(\bar{u}_k)}{\partial \bar{u}} (\bar{u}_{k+1} - \bar{u}_k) = \frac{\partial \bar{g}(\bar{u}_k)}{\partial \bar{u}} \bar{w}_k = -\bar{g}(\bar{u}_k) \quad (4.11)$$

onde k representa a iteração atual e $k + 1$ a iteração seguinte. O processo se inicia a partir de um vetor inicial estimado \bar{u}_0 .

Portanto, em cada iteração k , o valor estimado para a iteração seguinte $k + 1$, é obtido a partir de:

$$\bar{u}_{k+1} = \bar{u}_k + \bar{w}_k \quad (4.12)$$

Assim, o problema consiste em resolver a cada iteração k , o sistema de equações lineares definido pela Eq. (4.11) por um método numérico qualquer (direto ou indireto), o qual pode ser escrito de forma compacta por:

$$M(\bar{u}_k) \bar{w}_k = -\bar{g}(\bar{u}_k) \quad (4.13)$$

onde $M(\bar{u}_k) = \frac{\partial \bar{g}(\bar{u}_k)}{\partial \bar{u}}$ é denominada como matriz Jacobiana do processo.

Com o uso de notação indicial, os elementos da matriz Jacobiana devem ser calculados de forma exata por:

$$m_{ij} = \frac{\partial g_i}{\partial u_j} \quad (1 \leq i, j \leq n) \quad (4.14)$$

A convergência será obtida quando:

$$\|\bar{g}(\bar{u}_k)\| \leq \varepsilon \quad (4.15)$$

onde ε é uma tolerância pré-especificada com valor próximo a zero.

4.6. MÉTODO DE NEWTON MODIFICADO

Uma grande dificuldade com os métodos apresentados até agora neste capítulo é que eles requerem alto tempo computacional para resolver problemas com grande número de equações, e.g., uma matriz Jacobeana de grande dimensão a cada iteração que pode também ter elementos que requeiram muitas operações aritméticas, i.e., de difícil cálculo analiticamente. Assim, é recomendável buscar estratégias para redução do tempo computacional quando se aplicar o método de Newton.

4.6.1. Reutilização da matriz Jacobeana

Uma maneira de evitar esse custo é a de não computar uma nova matriz Jacobeana a cada iteração. Para tanto, pode-se pensar em reutilizar a matriz Jacobeana calculada para uma determinada iteração por várias outras iterações subsequentes, ou mais genericamente um operador fixo. Combinando as Eqs. (4.12) e (4.13) obtém-se a iteração de Newton por:

$$\bar{u}_{k+1} = \bar{u}_k - M^{-1}(\bar{u}_k)\bar{g}(\bar{u}_k) \quad (4.16)$$

Assim, ao invés de recalcular a matriz M a cada iteração, pode-se utilizar:

$$\bar{u}_{k+1} = \bar{u}_k - M^{-1}(\bar{u}_i)\bar{g}(\bar{u}_k) \quad (4.17)$$

onde o subscrito i representa uma determinada iteração (e.g., 0 – a primeira iteração).

Esse procedimento faz o operador $M^{-1}(\bar{u}_i)$ ser fixo por tantas iterações quanto se desejar, i.e., enquanto $\|\bar{g}(\bar{u}_k)\|$ mantiver um comportamento decrescente de uma iteração para a próxima, i.e., enquanto o processo se mantiver em um caminho de convergência. Portanto, uma nova matriz M é calculada somente quando $\|\bar{g}(\bar{u}_k)\|$ aumentar em relação à iteração anterior, mantendo-a fixa novamente enquanto $\|\bar{g}(\bar{u}_k)\|$ estiver reduzindo, e assim sucessivamente até o processo convergir para a solução.

4.6.2. Matriz Jacobeana numérica

Esta estratégia diz respeito ao cálculo dos elementos da matriz Jacobeana de acordo com a Eq. (4.14) numericamente. Para tanto, é possível utilizar-se uma aproximação numérica no cálculo da derivada, conforme se segue:

$$m_{ij} = \frac{\partial g_i}{\partial u_j} = \frac{\{g_i(u_1, u_2, \dots, u_j + \varepsilon, \dots, u_n) - g_i(u_1, u_2, \dots, u_n)\}}{\varepsilon} \quad (1 \leq i, j \leq n) \quad (4.18)$$

onde ε deve ser estabelecido como um valor suficientemente pequeno a fim do valor calculado para m_{ij} se aproximar do valor exato da derivada.

4.7. CONVERGÊNCIA DO MÉTODO DE NEWTON

Como todos os métodos enquadrados no item 4.3, o método de Newton pode ser descrito sinteticamente pela fórmula:

$$\bar{u}_{k+1} = \bar{G}(\bar{u}_k) \quad (4.3)$$

Assim, a condição para convergência é que $\bar{G}(\bar{u})$ seja um mapeamento contrativo. No entanto, a maioria dessas funções obtidas a partir do sistema de equações estabelecido pela Eq. (4.1) não leva à obtenção de funções $\bar{G}(\bar{u})$ que sejam contrativas considerando-se todo o domínio \mathfrak{R}^n , observando-se o comportamento de função contrativa apenas em parte do \mathfrak{R}^n . Por esta razão, é que se sabe que o método de Newton é convergente quando o vetor de valores iniciais estimado para a iteração de Newton é suficientemente próximo da solução do sistema de equações, ou seja, dentro da região do \mathfrak{R}^n em que $\bar{G}(\bar{u})$ apresenta o comportamento de função contrativa, aqui denominada como região de convergência do método. Pela mesma razão, o problema pode vir a ocorrer em um ponto intermediário da iteração de Newton, se o valor de \bar{u}_i calculado em uma iteração intermediária i estiver fora da região de convergência.

Uma das estratégias para lidar com a possibilidade de divergência em uma iteração intermediária do método é a assim chamada busca por linha (“line search”). A estratégia consiste de alterar a Eq. (4.12) como se segue (Bank e Rose, 1981):

$$\bar{u}_{k+1} = \bar{u}_k + t_k \bar{w}_k \quad (4.19)$$

O parâmetro t_k é conhecido como parâmetro de “line search” e há vários estudos na literatura para a sua melhor estimativa, basicamente porque $t_k \rightarrow 1$, tal que:

$$1 - t_k = O(\|\bar{g}(\bar{u}_k)\|) \quad (4.20)$$

ou seja, a medida que a iteração prossegue, $\|\bar{g}(\bar{u}_k)\| \rightarrow 0$.

A seguir, listam-se algumas maneiras de estimar o parâmetro t_k :

a) Bank e Rose (1981) sugerem a fórmula:

$$t_k = \frac{1}{1 + K_k \|\bar{g}(\bar{u}_k)\|} \quad (4.21)$$

onde K_k é uma sequência tal que $0 \leq K_k \leq K_0$, donde se observa que K_k reduz a cada iteração, e K_0 deve ser suficientemente grande. Note que para a iteração convergir, para $\delta \in [0,1]$:

$$\|\bar{g}(\bar{u}_{k+1})\| < \delta \|\bar{g}(\bar{u}_k)\| \quad (4.22)$$

Portanto, inicia-se com $t_k = 1$ reproduzindo a iteração de Newton e verifica-se se a Eq. (4.22) é satisfeita. Em caso positivo, prossegue-se com $t_k = 1$, e em caso negativo, procura-se reduzir t_k , por alguma lei, tal como a Eq. (4.21), por um certo número de sub-iterações até que a Eq. (4.22) seja verificada.

- b) Estima-se um valor constante $t_k < 1$ e inicia-se o processo da Eq. (4.19). Sempre que $\|\bar{g}(\bar{u}_k)\|$ aumentar, cria-se uma sub-iteração j , que divide t_k por um fator pré-especificado γ (e.g., $\gamma = 2$), a cada sub-iteração j , até que $\|\bar{g}(\bar{u}_k)\|$ seja decrescente. Na próxima iteração externa k , atribui-se a t_k o mesmo valor constante do início do processo, e assim sucessivamente, conforme se segue:

$$t_k^j = \frac{t_k^j}{\gamma} \quad (j \leq 0) \quad (4.23)$$

- c) Usa-se um processo aqui denominado de estimativa de t_k por segmento de reta secante, conforme mostra a Fig. 4.1.

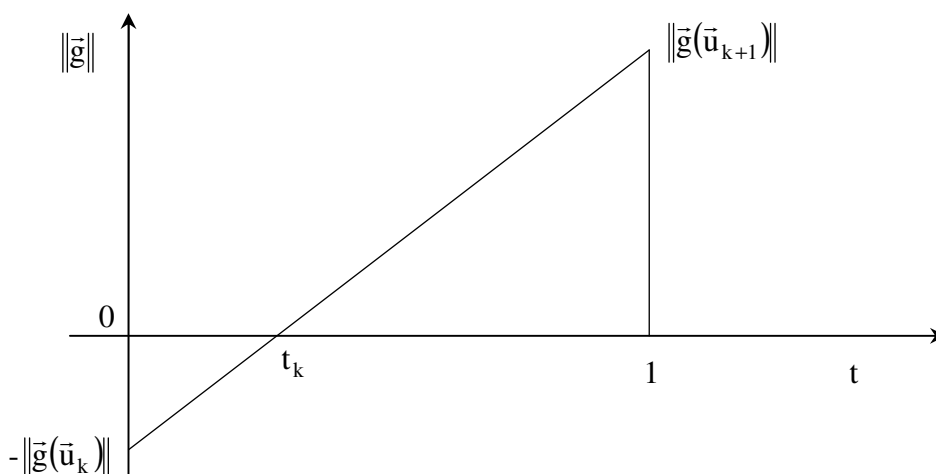


Figura 4.1 – Processo de determinação de t_k por segmento de reta secante.

Com base na equação do segmento de reta secante mostrado na Fig. 4.1, determina-se t_k conforme se segue:

$$t_k = \frac{\|\bar{g}(\bar{u}_k)\|}{\|\bar{g}(\bar{u}_{k+1})\| + \|\bar{g}(\bar{u}_k)\|} \quad (4.24)$$

4.8. MÉTODO DE GAUSS-SEIDL NÃO LINEAR

O aqui denominado método de Gauss-Seidl não linear consiste de uma analogia do procedimento iterativo de Gauss-Seidl apresentado no Capítulo 3 para sistemas de equações lineares. De fato, o procedimento busca resolver seqüencialmente cada equação do sistema para cada incógnita, mantendo fixos os valores conhecidos das outras incógnitas oriundos da iteração anterior e utilizando os valores já conhecidos da iteração atual.

Assim, deriva-se o método a partir do sistema de equações representado de forma compacta por:

$$\bar{g}(\bar{u}) = 0 \quad (4.1)$$

Resolve-se, portanto, a partir de um valor inicial estimado $\bar{u}^{(0)}$ por um dos métodos de solução de equações não lineares de uma incógnita apresentados no Capítulo 2 (e.g., bisseção, Newton, secante), em seqüência, cada equação do sistema representado por (4.1) para obter $u_i^{(k+1)}$, ($1 \leq i \leq n$), conforme se segue:

$$\begin{aligned} g_1(u_1^{(k+1)}, u_2^{(k)}, \dots, u_n^{(k)}) &= 0 \quad \text{para obter } u_1^{(k+1)} \\ g_2(u_1^{(k+1)}, u_2^{(k+1)}, u_3^{(k)}, \dots, u_n^{(k)}) &= 0 \quad \text{para obter } u_2^{(k+1)} \\ g_3(u_1^{(k+1)}, u_2^{(k+1)}, u_3^{(k+1)}, u_4^{(k)}, \dots, u_n^{(k)}) &= 0 \quad \text{para obter } u_3^{(k+1)} \\ &\vdots \\ g_n(u_1^{(k+1)}, u_2^{(k+1)}, \dots, u_{n-1}^{(k+1)}, u_n^{(k+1)}) &= 0 \quad \text{para obter } u_n^{(k+1)} \end{aligned} \quad (4.25)$$

A convergência será obtida quando:

$$\|\bar{g}(\bar{u}^{(k)})\| \leq \varepsilon \quad (4.26)$$

onde ε é uma tolerância pré-especificada com valor próximo a zero.

4.9. MÉTODOS DE CONTINUAÇÃO

Todos os métodos até aqui discutidos comumente apresentam a possibilidade de não convergirem para a solução. Este continua a ser o grande desafio para resolver problemas não lineares. O problema está diretamente ligado à falta de um raio de convergência suficientemente grande inerente ao método em questão. Enfim, feita uma estimativa inicial para o vetor solução, \bar{u}_0 , o método iterativo pode não ser capaz de convergir para o vetor solução, \bar{u} , uma vez que a estimativa inicial se encontra muito distante do resultado desejado.

Há duas maneiras principais de se lidar com o problema de obter boas estimativas iniciais para o vetor solução. As duas envolvem procedimentos de busca (ou varredura) pela

solução. A primeira delas é a criação de um problema transiente artificial, inserindo na Eq. (4.1) um parâmetro de “tempo”, a partir do qual a solução é obtida em um “instante” inicial t_0 onde o sistema é de fácil solução, passando-se a utilizar essa solução convergida como estimativa “inicial” para o instante $t_1 = t_0 + \Delta t$, onde Δt é um incremento de “tempo” suficientemente pequeno tal que seja possível a convergência no “instante” seguinte, e assim sucessivamente, até atingir um valor de t que seja correspondente ao sistema de equações original a ser resolvido. Este método é conhecido em Mecânica dos Sólidos na aplicação do método de Elementos Finitos como método de carga incremental (Zienkiewicz e Taylor, 1989).

A segunda maneira consiste de se aproximar gradualmente da solução final através de uma série de soluções intermediárias. Esses resultados intermediários podem ter interesse físico, ou simplesmente serem meios de se chegar a uma solução desejada ao final do processo. Formalmente, esses algoritmos são conhecidos como métodos de “continuação” (Seydel, 1990), e podem ser utilizados com qualquer um dos métodos previamente descritos neste Capítulo.

Comumente, um sistema de equações não lineares representativo de um sistema físico qualquer depende de um ou mais parâmetros que caracterizam sua resposta (e.g., o número de Reynolds em Mecânica dos Fluidos, a magnitude de uma condição de contorno). Para tratar essa questão, assume-se que a solução da Eq. (4.1) depende de um parâmetro real, λ . Portanto, o problema passa a ser formulado matematicamente como se segue.

Resolva o sistema de equações:

$$\bar{g}(\bar{u}, \lambda) = 0 \quad (4.27)$$

para obter \bar{u} , para vários valores de λ e determine o caminho $\bar{u} = \bar{u}(\lambda)$, tal que $\bar{u} \in \mathfrak{R}^n$, $\lambda \in \mathfrak{R}$, $\bar{g} : \mathfrak{R}^{n+1} \rightarrow \mathfrak{R}^n$.

A solução é obtida por métodos de continuação em dois passos gerais:

- i) Inicia-se com uma solução convergida $\bar{u}_0 \in \mathfrak{R}^n$, $\lambda_0 \in \mathfrak{R}$, i.e., $\bar{g}(\bar{u}_0, \lambda_0) = 0$, e
- ii) Para vários valores de λ resolva $\bar{g}(\bar{u}, \lambda) = 0$.

O segundo passo da solução do problema se aproveita dos valores previamente convergidos de \bar{u} e λ . Esta é a essência do método de continuação.

O objetivo é o de encontrar uma função que represente o caminho descrito por \bar{u} e λ . No entanto, o problema é que podem haver pontos em que $\partial \bar{g} / \partial \bar{u} = 0$ e $\bar{u} = \bar{u}(\lambda)$ não pode ser explicitado (pontos de inflexão). Portanto, é necessário encontrar uma parametrização γ , tal que $\bar{u} = \bar{u}(\gamma)$ e $\lambda = \lambda(\gamma)$, e fixar γ no ponto inicial, i.e.: $\bar{u}_0 = \bar{u}(\gamma_0)$ e $\lambda_0 = \lambda(\gamma_0)$.

Uma das parametrizações mais usadas é a conhecida como “comprimento de arco” s . Neste caso, $\bar{u} = \bar{u}(s)$ e $\lambda = \lambda(s)$; $\bar{u}_0 = \bar{u}(0)$ e $\lambda_0 = \lambda(0)$.

Os métodos de continuação para resolver o problema formulado pela Eq. (4.27) são classificados de acordo com o grau de dificuldade em ordens, iniciando pela “ordem-zero”. Um método de continuação simples e eficaz largamente utilizado em problemas de Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor de “ordem-zero” consiste em resolver uma série de problemas aumentando gradualmente o valor do parâmetro de continuação λ . A solução convergida em um valor λ_n é usada como valor inicial do vetor solução no próximo passo $\lambda_{n+1} = \lambda_n + \Delta \lambda$, com qualquer método numérico que esteja sendo usado para resolver o

sistema de equações (e.g., Newton). No entanto, em problemas em que há a necessidade de detectar bifurcações, o método “ordem-zero” não apresenta boa convergência.

O método de continuação mais simples de “primeira ordem” assume que \bar{g} tenha derivadas contínuas em relação a \bar{u} e λ . Desta maneira, uma série de Taylor de $\bar{g}(\bar{u}, \lambda)$ pode ser usada com truncamento na primeira derivada para obter:

$$\left. \frac{\partial \bar{g}}{\partial \bar{u}} \right|_{\bar{u}, \lambda} \Delta \bar{u} = - \left. \frac{\partial \bar{g}}{\partial \lambda} \right|_{\bar{u}, \lambda} \Delta \lambda \quad (4.28)$$

que permite deduzir a seguinte relação de recorrência:

$$\bar{u}_{n+1} = \bar{u}_n - A^{-1}(\bar{u}_n, \lambda_n) \left. \frac{\partial \bar{g}}{\partial \lambda} \right|_{\bar{u}_n, \lambda_n} \Delta \lambda \quad (4.29)$$

onde $A = \left. \frac{\partial \bar{g}}{\partial \bar{u}} \right|_{\bar{u}, \lambda}$ e $\Delta \lambda = \lambda_{n+1} - \lambda_n$.

Observando a Eq. (4.29) percebe-se que esquemas de maior ordem podem ser derivados, bastando para isso considerar derivadas de maior ordem no truncamento da série de Taylor de $\bar{g}(\bar{u}, \lambda)$. Neste livro, apenas o esquema de primeira ordem é tratado.

Quando $\Delta \lambda$ é pequeno, é provável que a nova solução \bar{u}_{n+1} seja bastante próxima da verdadeira solução para λ_{n+1} , portanto, espera-se que usando \bar{u}_{n+1} como valor inicial, o sistema definido pela Eq. (4.27) venha a convergir com qualquer método numérico que esteja sendo usado para resolvê-lo. No entanto, a medida que se use maiores valores para $\Delta \lambda$, o valor previsto para \bar{u}_{n+1} geralmente se distanciará da verdadeira curva de solução. Nesses casos, o valor previsto pode ser corrigido. De fato, o problema reside na escolha de $\Delta \lambda$. A menos que a solução intermediária seja de interesse, $\Delta \lambda$ deve ser tão grande quanto possível para minimizar o esforço computacional. No entanto, o tamanho de qualquer $\Delta \lambda$ é limitado pelo raio de convergência do método numérico que esteja sendo usado para obter a solução corrigida em λ_{n+1} . Na realidade, usa-se a assim chamada “continuação adaptativa” via procedimentos de seleção heurística de $\Delta \lambda$ (Seydel, 1990). Um desses procedimentos é descrito a seguir.

Assume-se em um passo “j” dispõe-se dos valores \bar{u}_j , λ_j e s_j , e o passo de “comprimento de arco” é Δs_j .

A solução no passo $j + 1$ é procurada tal que:

$$\bar{g}(\bar{u}_{j+1}, \lambda_{j+1}) = 0 \quad (4.30)$$

e

$$d\{(\bar{u}_j, \lambda_j), (\bar{u}_{j+1}, \lambda_{j+1})\} = \Delta s_j \quad (4.31)$$

onde d representa uma função distância.

O algoritmo que é proposto consiste de resolver no passo j para a obtenção de $\Delta \bar{u}_j, \Delta \lambda_j$, $\bar{u}_{j+1} = \bar{u}_j + \Delta \bar{u}_j$ e $\lambda_{j+1} = \lambda_j + \Delta \lambda_j$. $\Delta \bar{u}_j, \Delta \lambda_j$ devem satisfazer as equações:

$$\bar{g}(\bar{u}_j + \Delta\bar{u}_j, \lambda_j + \Delta\lambda_j) = 0 \quad (4.32)$$

e

$$\|\Delta\bar{u}_j, \Delta\lambda_j\| = \Delta s_j \quad (4.33)$$

onde $\|\cdot\|$ representa uma norma em $\mathfrak{R}^{n+1} = \mathfrak{R}^n \times \mathfrak{R}$.

A norma define o comprimento de arco. A Equação (4.33) representa a restrição. Consequentemente o algoritmo consiste de :

1. Dada uma solução inicial $\bar{u}_0 \in \mathfrak{R}^n$, $\lambda_0 \in \mathfrak{R}$, e um passo de comprimento de arco inicial Δs_0
2. Para $j = 0$ até n faça:
 - a) Compute incrementos $\Delta\bar{u}_j, \Delta\lambda_j$ a partir de
$$\begin{cases} \bar{g}(\bar{u}_j + \Delta\bar{u}_j, \lambda_j + \Delta\lambda_j) = 0 \\ \|\Delta\bar{u}_j, \Delta\lambda_j\| = \Delta s_j \end{cases}$$
 - b) Compute $\bar{u}_{j+1} = \bar{u}_j + \Delta\bar{u}_j$ e $\lambda_{j+1} = \lambda_j + \Delta\lambda_j$
 - c) Compute um novo comprimento de arco Δs_{j+1} .

O problema do item a) consiste da solução de um sistema de equações não lineares. Portanto, há dois passos envolvidos no processo:

a.1) Encontre valores iniciais $\Delta\bar{u}_j^{(0)}$ e $\Delta\lambda_j^{(0)}$

a.2) A partir dos valores iniciais $\Delta\bar{u}_j^{(0)}$ e $\Delta\lambda_j^{(0)}$ resolva o sistema:

$$\begin{cases} \bar{g}(\bar{u}_j + \Delta\bar{u}_j, \lambda_j + \Delta\lambda_j) \\ \|\Delta\bar{u}_j, \Delta\lambda_j\| = \Delta s_j \end{cases} \text{ para obter } \Delta\bar{u}_j \text{ e } \Delta\lambda_j$$

O passo a.1) é comumente conhecido como de “predição”. O passo a.2) é conhecido como de “correção”.

Há vários tipos de métodos de predição, i.e., tangente, secante, e o de predição nula, i.e., $\Delta\bar{u}_j^{(0)} = 0$ e $\Delta\lambda_j^{(0)} = 0$, ou de maior ordem.

Como o método da secante envolve dois pontos e métodos de maior ordem envolvem vários pontos, somente o método da tangente é utilizado neste texto, admitindo que \bar{g} é de classe C^1 com relação tanto a \bar{u} como a λ . Portanto, usando a Eq. (4.28), obtém-se:

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial \bar{g}}{\partial \bar{u}} \right|_{\bar{u}_j, \lambda_j} \Delta\bar{u}_j^{(0)} = - \left. \frac{\partial \bar{g}}{\partial \lambda} \right|_{\bar{u}_j, \lambda_j} \Delta\lambda_j^{(0)} \\ \|\Delta\bar{u}_j^{(0)}, \Delta\lambda_j^{(0)}\| = \Delta s_j \end{cases} \quad (4.34)$$

Assumindo que $A_j = \left. \frac{\partial \bar{g}}{\partial \bar{u}} \right|_{\bar{u}_j, \lambda_j}$ seja não singular, então:

$$\Delta\bar{u}_j^{(0)} = - A_j^{-1} \left. \frac{\partial \bar{g}}{\partial \lambda} \right|_{\bar{u}_j, \lambda_j} \Delta\lambda_j^{(0)} \quad (4.35)$$

e portanto:

$$\left\| -A_j^{-1} \frac{\partial \bar{g}}{\partial \lambda} \Big|_{\bar{u}_j, \lambda_j}, 1 \right\| |\Delta \lambda_j^{(0)}| = \Delta s_j \quad (4.36)$$

ou

$$|\Delta \lambda_j^{(0)}| = \frac{\Delta s_j}{\left\| -A_j^{-1} \frac{\partial \bar{g}}{\partial \lambda} \Big|_{\bar{u}_j, \lambda_j}, 1 \right\|} \quad (4.36')$$

Observe que na Eq. (4.36') há dois valores para $\Delta \lambda_j^{(0)}$. A experiência mostra que é preferível utilizar o valor positivo. Com o valor determinado para $\Delta \lambda_j^{(0)}$, utiliza-se a Eq. (4.35) para obter $\Delta \bar{u}_j^{(0)}$.

O passo a.2) de correção usualmente consiste da solução de um sistema de equações não lineares. O método de Newton é o mais utilizado e as incógnitas são $\Delta \bar{u}_j$ e $\Delta \lambda_j$.

O passo de controle de comprimento de arco Δs_j utilizando um valor fixo pré-especificado ou usando um esquema baseado no número de iterações, conforme se segue:

$$\Delta s_{j+1} = \Delta s_j \frac{n_{\text{ref}}}{n_j + 1} \quad (4.37)$$

onde n_j é o número de iterações feitas pelo passo de correção, e n_{ref} é um número de referência estabelecido como um número aceitável de iterações.

O projeto 4.1 ao final deste capítulo propõe um problema em que só é possível a obtenção de soluções ao longo de toda a faixa de variação de um de seus parâmetros através do uso de um método de continuação.

4.10. PROBLEMAS PROPOSTOS

- 4.1. Demonstre que a condição de convergência para o método da iteração funcional é que $g(u)$ seja um mapeamento contrativo.
- 4.2. Demonstre a taxa de convergência do método de Newton quando aplicado a sistemas de equações não-lineares.
- 4.3. Deseja-se construir um menisco, constituído pela região de intersecção entre dois círculos, cujas equações são: $x^2 + y^2 - 4x - 6y - 12 = 0$ e $x^2 + y^2 - 10x - 8y + 16 = 0$. Pede-se para calcular a distância entre as extremidades do menisco (ou seja, a distância

entre os pontos de intersecção entre ambas os círculos). Utilize para tanto o Método de Newton-Raphson.

4.4. Obtenha os pontos de intersecção entre os seguintes pares de curvas. Como forma de obter boas estimativas iniciais para a utilização de métodos numéricos, faça gráficos de tais curvas (Note que, em alguns casos, existem múltiplos pares de soluções). Empregue os métodos de Newton e da secante para a obtenção de tais soluções numéricas.

a) $y = 8 \operatorname{sen}(x)$ e $x = y^2 + 2y - 4$

b) $y = \ln(4x) + 5$ e $x = 2 \cos(y)$

c) $y = x^3 + 2x^2 - 6x + 8$ e $x = \tan(y)$

d) $y = \ln(x) + \cos(x)$ e $x = y^2 + 2y - 5$

4.5. Considere as espécies químicas A_2 , B_2 , AB e A_2B_2 . Deseja-se a partir das espécies A_2 e B_2 obter como produto a espécie A_2B_2 . Teoricamente, tal reação poderia ser realizada através da seguinte reação química direta:



Na prática, contudo, que esse processo está relacionado a duas reações químicas intermediárias e reversíveis, apresentadas a seguir:



Com base nas equações das reações químicas, pode-se então, avaliar o número de moles (n) de cada uma das espécies químicas presentes na mistura final: $n(A_2) = x$, $n(B_2) = x$, $n(AB) = 2y$ e $n(A_2B_2) = 1-x-y$. A soma de todos os valores anteriores fornece o número total de moles da mistura (n_T), que nesse caso é $n_T = 1+x+y$. Para se avaliar a composição da mistura, torna-se necessário determinar os valores de x e de y . Para tanto, recorre-se às seguintes relações:

$$K_1 = \frac{Y(A_2) Y(B_2)}{Y(A_2B_2)}$$

$$K_2 = \frac{[Y(AB)]^2}{Y(A_2B_2)}$$

que estão relacionadas às reações reversíveis apresentadas anteriormente. Nessas relações, K_1 e K_2 são as constantes de cada uma das reações químicas e $Y(z)$ é a fração molar da espécie química z , que é obtida dividindo-se $n(z)$ por n_T . Nesse contexto, determine os valores dos números de moles de cada uma das espécies químicas da mistura, sabendo-se que $K_1 = 0,002$ e $K_2 = 0,0015$. Utilize, para tanto, os métodos de Newton e de Newton modificado.

4.6. Solucione o seguinte sistema de equações não-lineares, empregando os métodos de Newton e Newton modificado. Tal sistema é proveniente de reações químicas, obtidas de modo semelhante ao mostrado no exercício anterior.

$$K_1 = \frac{x^2}{(1-x-y)(1+x+y+z+w)}$$

$$K_2 = \frac{4y^2}{(1-x-y)(1+x+y+z+w)}$$

$$K_3 = \frac{4z^2}{(x-z)(1+x+y+z+w)}$$

$$K_4 = \frac{4w^2}{(x-w)(1+x+y+z+w)}$$

Admita os seguintes valores para K_1 , K_2 , K_3 e K_4 , respectivamente: 0,003, 0,0025, 0,0005 e 0,0003.

- 4.7. Deseja-se estudar a distribuição da temperatura ao longo da espessura de uma parede plana, com geração volumétrica de calor, para a condição de regime permanente. Tal fenômeno pode ser modelado através da seguinte equação diferencial:

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) + \dot{q} = 0$$

onde x é a coordenada espacial, T é a temperatura, k é a condutividade térmica do material e \dot{q} é a taxa volumétrica de geração de calor. Para este estudo, considera-se que a condutividade térmica do material seja variável e dependente unicamente da temperatura, sendo modelada através de uma relação do tipo $k(T) = aT$, onde a é uma constante conhecida. Empregando-se um método numérico para a discretização da equação diferencial original, obteve-se o seguinte sistema de equações:

$$\frac{\alpha T_1 T_2 (T_2 - T_1)}{T_1 + T_2} \frac{\Delta x}{\Delta x} - 2\alpha T_A \frac{(T_1 - T_A)}{\Delta x} = -\dot{q} \Delta x$$

$$\frac{\alpha T_i T_{i+1} (T_{i+1} - T_i)}{T_i + T_{i+1}} \frac{\Delta x}{\Delta x} - \frac{\alpha T_{i-1} T_i (T_i - T_{i-1})}{T_{i-1} + T_i} \frac{\Delta x}{\Delta x} = -\dot{q} \Delta x, \quad \text{para } i = 2, 3, \dots, N-1$$

$$2\alpha T_B \frac{(T_B - T_N)}{\Delta x} - \frac{\alpha T_{N-1} T_N (T_N - T_{N-1})}{T_{N-1} + T_N} \frac{\Delta x}{\Delta x} = -\dot{q} \Delta x$$

Considerando-se os seguintes valores:

$\alpha = 2$; $T_A = 10$; $T_B = 20$; $\Delta x = 0,2$; $\dot{q} = 1000$; $N = 5$, resolva o sistema obtido, empregando-se os métodos de Newton e Newton modificado.