

# Métodos Numéricos e Computacionais em Ciências e Engenharias

Prof. Americo Cunha

Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ

[americo.cunha@uerj.br](mailto:americo.cunha@uerj.br)

[www.americocunha.org](http://www.americocunha.org)



# Os quatro paradigmas da ciência

## 1. Ciência Experimental

- $\sim 1000$  anos
- descrição de fenômenos naturais via observação empírica

## 2. Ciência Teórica

- $\sim 400$  anos
- generalizações via equações matemáticas

## 3. Ciência Computacional

- $\sim 60$  anos
- exploração de fenômenos complexos via computação

## 4. Ciência de Dados

- $\sim 10$  anos
- informações extraídas de grandes bases de dados (estatística)



T. Hey and S. Tansley and K. Tolle (Editors), *The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery*, Microsoft Research, 2009.



# Modelos: idealizações (simplificações) da realidade

A realidade é complexa demais para ser entendida em todos os seus detalhes, sendo parcialmente compreendida com o auxílio dos mais diversos tipos de modelos

**Modelo  $\neq$  Realidade**

**Modelo = Caricatura da Realidade**

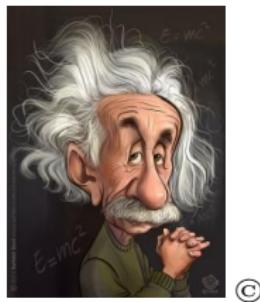


# Modelos: idealizações (simplificações) da realidade

A realidade é complexa demais para ser entendida em todos os seus detalhes, sendo parcialmente compreendida com o auxílio dos mais diversos tipos de modelos

**Modelo  $\neq$  Realidade**

**Modelo = Caricatura da Realidade**



©

**modelo**



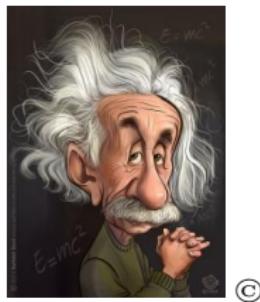
© Figura obtida em: <https://br.pinterest.com/pin/257197828695866478>

# Modelos: idealizações (simplificações) da realidade

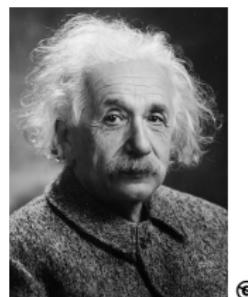
A realidade é complexa demais para ser entendida em todos os seus detalhes, sendo parcialmente compreendida com o auxílio dos mais diversos tipos de modelos

**Modelo  $\neq$  Realidade**

**Modelo = Caricatura da Realidade**



**modelo**

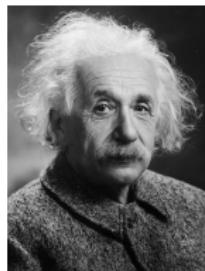


**realidade**

© Figura obtida em: <https://br.pinterest.com/pin/257197828695866478>

Para toda realidade, vários modelos são possíveis

Albert Einstein

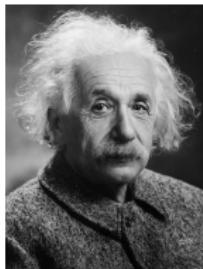


©



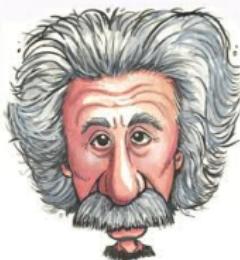
# Para toda realidade, vários modelos são possíveis

Albert Einstein

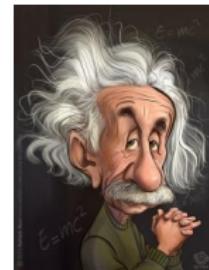


©

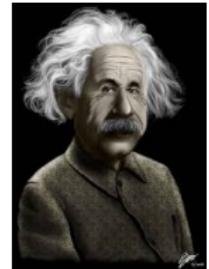
Caricaturas de Albert Einstein



©



©



©

© Figuras obtidas em:

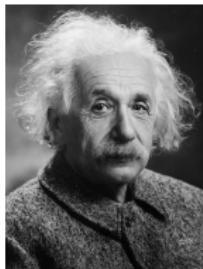
<https://www.aboutfacesentertainment.com/pages/einstein-caricatures.html>

<https://br.pinterest.com/pin/257197828695866478>

<https://br.pinterest.com/pin/475200198161710508>

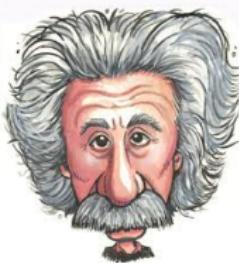
# Para toda realidade, vários modelos são possíveis

Albert Einstein

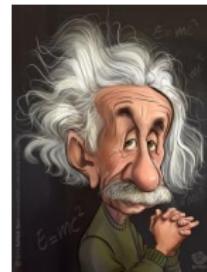


©

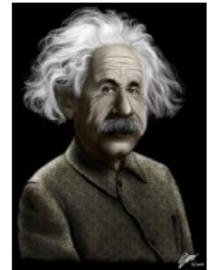
Caricaturas de Albert Einstein



©



©



©

**Um bom modelo captura as principais características da realidade de interesse**

© Figuras obtidas em:

<https://www.aboutfacesentertainment.com/pages/einstein-caricatures.html>

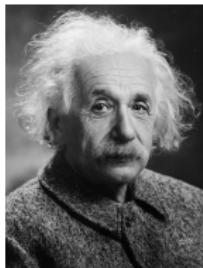
<https://br.pinterest.com/pin/257197828695866478>

<https://br.pinterest.com/pin/475200198161710508>



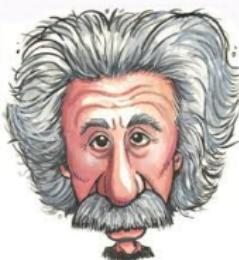
# Para toda realidade, vários modelos são possíveis

Albert Einstein

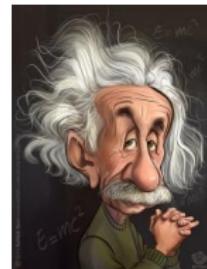


©

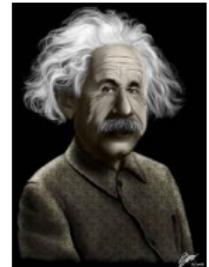
Caricaturas de Albert Einstein



©



©



©

**Um bom modelo captura as principais características da realidade de interesse**

**Modelos com diferentes níveis de fidelidade podem ser construídos!**

© Figuras obtidas em:

<https://www.aboutfacesentertainment.com/pages/einstein-caricatures.html>

<https://br.pinterest.com/pin/257197828695866478>

<https://br.pinterest.com/pin/475200198161710508>



# Não pense num modelo como certo ou errado...



*"All models are wrong but  
some are useful!"*

George E. P. Box

# Não pense num modelo como certo ou errado...



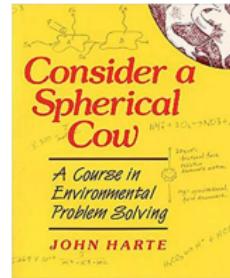
© ⓘ ⓘ ⓘ

*"All models are wrong but  
some are useful"*

George E. P. Box



©



©



Forbidden Mango

©

Figuras obtidas em:

[https://en.wikipedia.org/wiki/George\\_E.\\_P.\\_Box](https://en.wikipedia.org/wiki/George_E._P._Box) © ⓘ ⓘ ⓘ

<https://me.me/i/forbidden-mango-54a41b7843ca4bf38fc5cf5e0ea396d2> ©

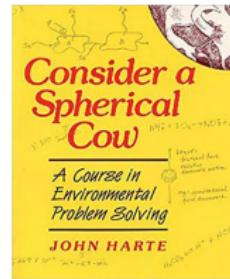
Exemplo da manga sugerido pelo Prof. Augusto Barbosa (UERJ).

# Não pense num modelo como certo ou errado...



*"All models are wrong but some are useful!"*

George E. P. Box



Forbidden Mango



## Pense um modelo como útil ou não útil!

Figuras obtidas em:

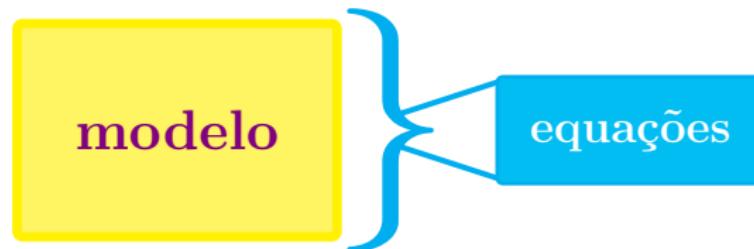
[https://en.wikipedia.org/wiki/George\\_E.\\_P.\\_Box](https://en.wikipedia.org/wiki/George_E._P._Box)

<https://me.me/i/forbidden-mango-54a41b7843ca4bf38fc5cf5e0ea396d2>

Exemplo da manga sugerido pelo Prof. Augusto Barbosa (UERJ).

# Modelo computacional: uma “máquina” preditiva

informações



previsões



\* Figura elaborada por Michel Tosin

# Modelos computacionais e aplicações

# Equação de estado de um gás

Lei dos gases ideais:

$$P V = n R T$$

Equação de Van der Waals:

$$\left( P + a \frac{n^2}{V^2} \right) (V - n b) = n R T$$

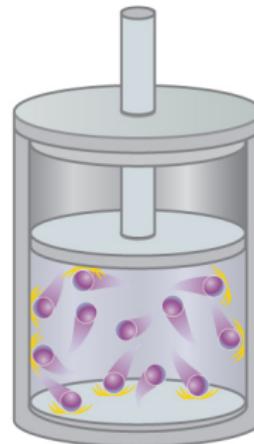


Figura adaptada de <http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@09.110> CC BY-NC-SA

# Equação de estado de um gás

Lei dos gases ideais:

$$P V = n R T \quad \Rightarrow \quad V = \frac{n R T}{P}$$

Equação de Van der Waals:

$$\left( P + a \frac{n^2}{V^2} \right) (V - n b) = n R T$$

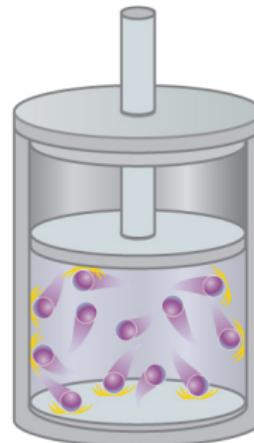


Figura adaptada de <http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@09.110> CC BY-NC-SA

# Equação de estado de um gás

Lei dos gases ideais:

$$P V = n R T \implies V = \frac{n R T}{P}$$

Equação de Van der Waals:

$$\left( P + a \frac{n^2}{V^2} \right) (V - n b) = n R T$$

$$\implies V = n b + \frac{n R T}{\left( P + a \frac{n^2}{V^2} \right)}$$

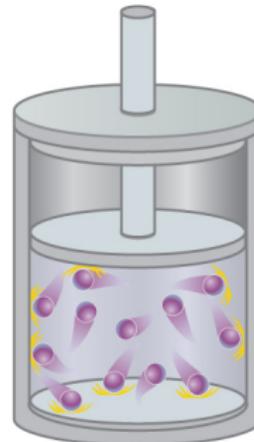


Figura adaptada de <http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@09.110> CC BY-NC-SA

# Equação de estado de um gás

Lei dos gases ideais:

$$P V = n R T \implies V = \frac{n R T}{P}$$

Equação de Van der Waals:

$$\left( P + a \frac{n^2}{V^2} \right) (V - n b) = n R T$$

$$\implies V = n b + \frac{n R T}{\left( P + a \frac{n^2}{V^2} \right)}$$

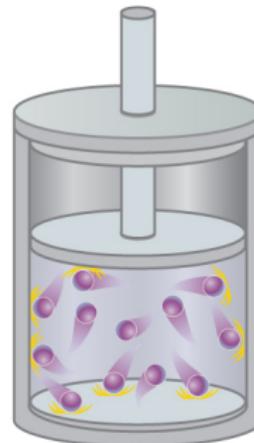


Figura adaptada de <http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@09.110> CC BY-NC-SA

# Equação de estado de um gás

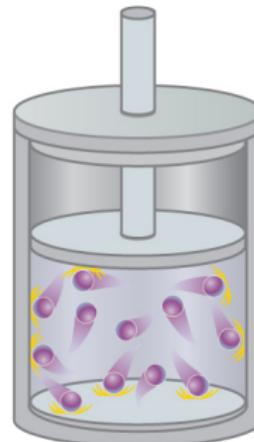
Lei dos gases ideais:

$$P V = n R T \implies V = \frac{n R T}{P}$$

Equação de Van der Waals:

$$\left( P + a \frac{n^2}{V^2} \right) (V - n b) = n R T$$

$$\implies V = n b + \frac{n R T}{\left( P + a \frac{n^2}{V^2} \right)}$$



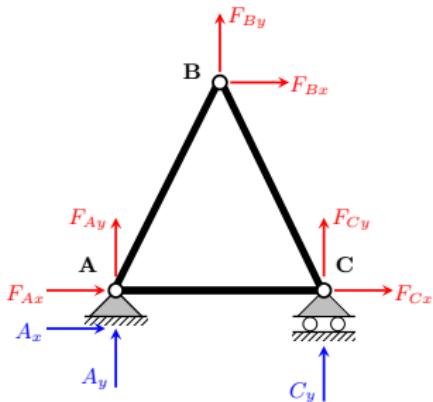
CC BY SA

Equações algébricas desse tipo são “complicadas”!



Figura adaptada de <http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@09.110> CC BY SA

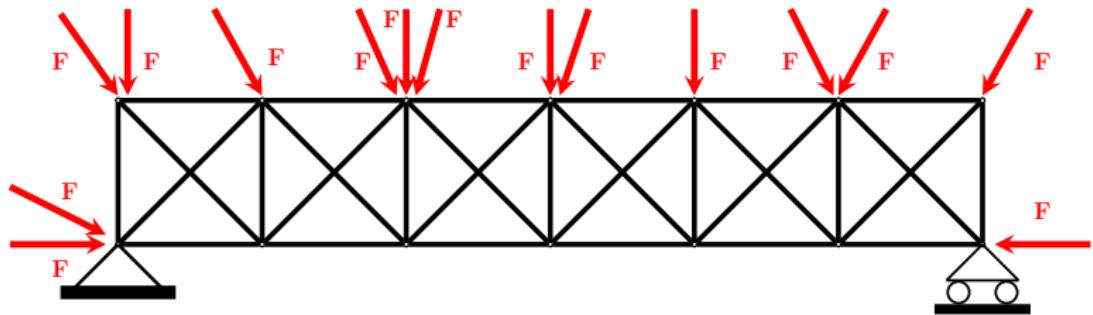
# Análise estrutural



Equilíbrio mecânico:

$$\left[ \begin{array}{cccccc} \cos \alpha & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \sin \alpha & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\cos \alpha & 0 & \cos \beta & 0 & 0 & 0 \\ -\sin \alpha & 0 & -\sin \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -\cos \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin \beta & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} AB \\ AC \\ BC \\ A_x \\ A_y \\ C_y \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} -F_{Ax} \\ -F_{Ay} \\ -F_{Bx} \\ -F_{By} \\ -F_{Cx} \\ -F_{Cy} \end{array} \right\}$$

\* Adaptado das aulas do Prof. Samuel da Silva (UNESP). Figura por Marcos Vinicius Issa.

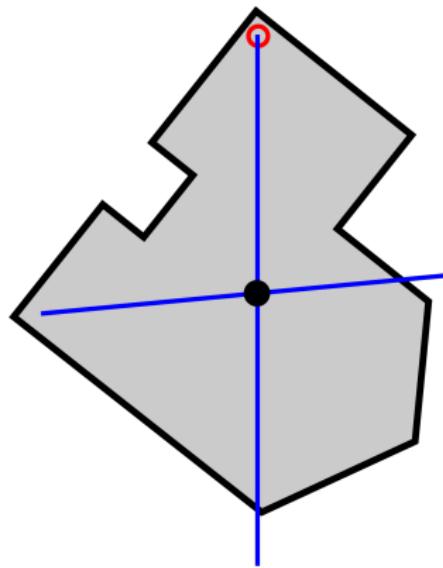


Para estruturas complexas o equilíbrio mecânico produz um sistema linear “grande”



\* Figura elaborada por Marcos Vinicius Issa

# Centróide de geometrias complexas

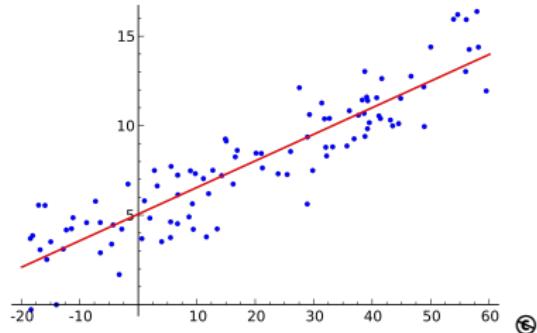


$$\bar{x} = \frac{1}{A(\mathcal{R})} \int_{\mathcal{R}} x \, dA$$

$$\bar{y} = \frac{1}{A(\mathcal{R})} \int_{\mathcal{R}} y \, dA$$

O cálculo de centróides em geometrias complexas  
lida com integrais manualmente “intratáveis”

# Curvas de tendência

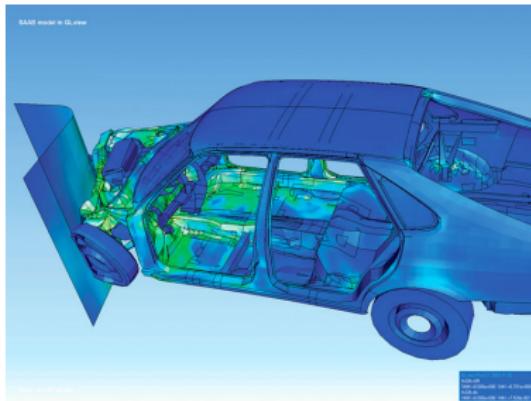


Curvas que “aproximam” dados vem de sistemas lineares retangulares, que em geral não tem solução!



\* Figura obtida em <http://www.covid19rj.org>

# Elastodinâmica de veículos terrestres



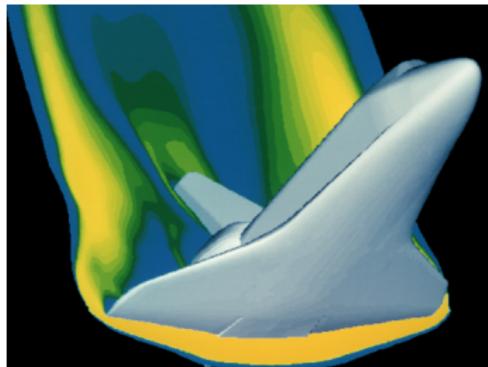
$$\begin{aligned}\rho \ddot{\mathbf{u}} + c \dot{\mathbf{u}} &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}^T \\ \boldsymbol{\epsilon} &= \mathcal{G}(\nabla \mathbf{u}) \\ \boldsymbol{\sigma} &= \mathcal{C}(\boldsymbol{\epsilon})\end{aligned}$$

- + condições de contorno
- + condições iniciais

Ingredientes desse modelo computacional:

- equações diferenciais “complexas”
- integrais “intratáveis”
- “grandes” sistemas algébricos (lineares e não lineares)

# Aerodinâmica de veículos aeroespaciais



$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} \\ \boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}^T \\ \boldsymbol{\sigma} &= \mathcal{C}(\mathbf{u})\end{aligned}$$

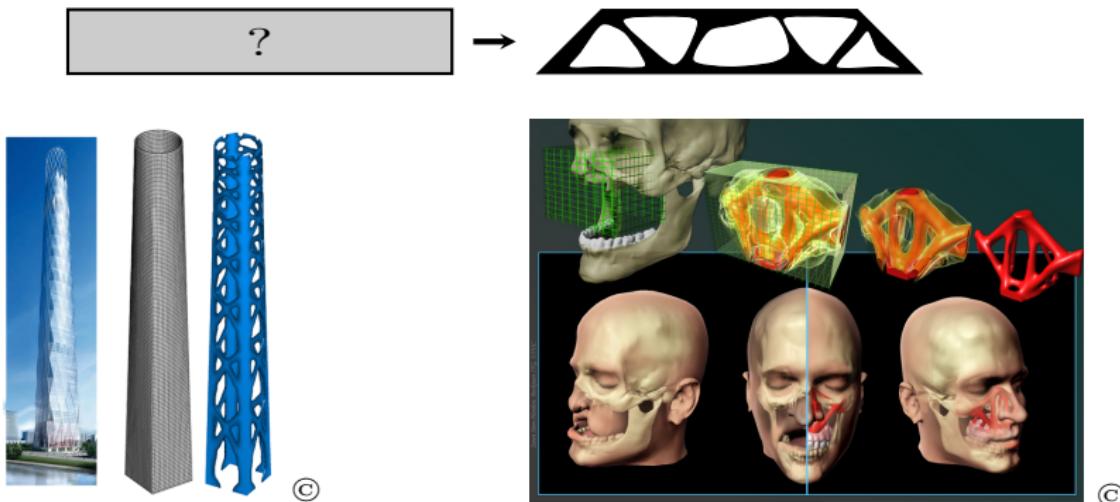
+ condições de contorno  
+ condições iniciais

Ingredientes desse modelo computacional:

- equações diferenciais “complexas”
- integrais “intratáveis”
- “grandes” sistemas algébricos (lineares e não lineares)



# Otimização topológica em sistemas de engenharia



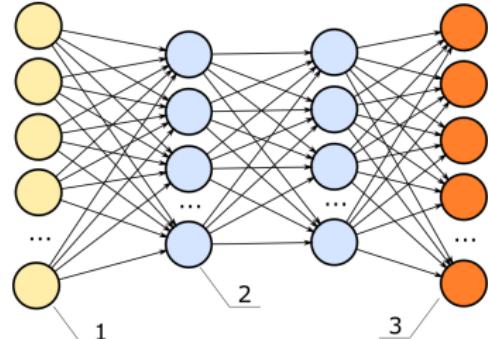
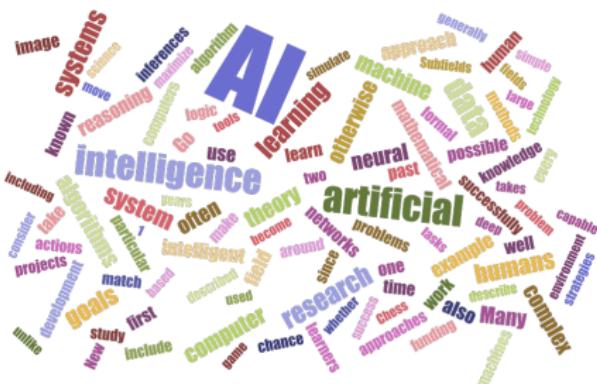
Ingredientes do processo de otimização:

- derivadas “difíceis”
- solução de “grandes” sistemas (lineares e não lineares)



© Figuras adaptadas das aulas do Prof. Gláucio H. Paulino (Georgia Tech)

Inteligência artifical e aprendizado de máquina



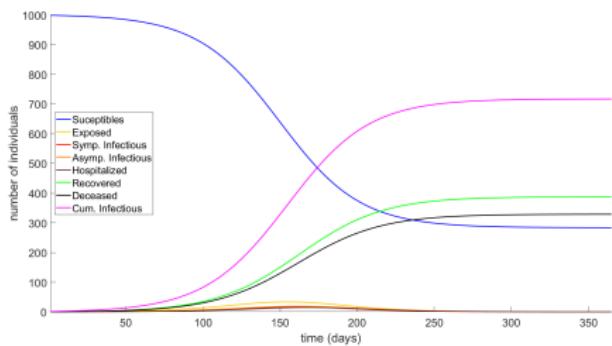
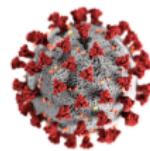
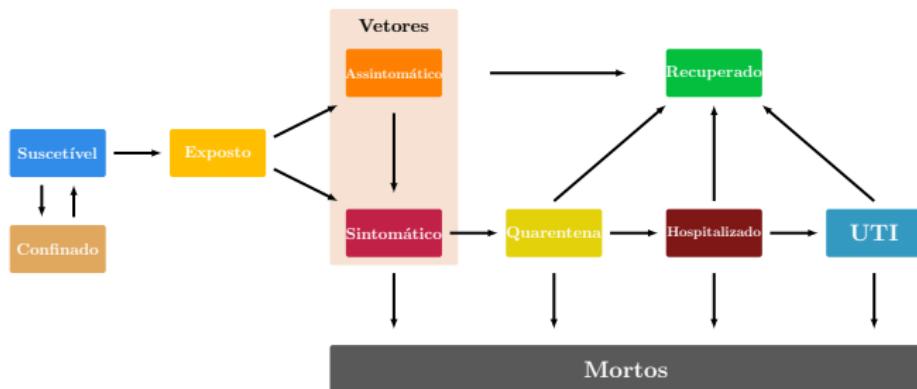
Ingredientes do treinamento (aprendizado):

- problema de otimização (cálculo de derivadas)
  - solução de sistemas lineares retangulares



\* Word Cloud gerado em <https://www.jasondavies.com/wordcloud/>

# Propagação de uma epidemia



Esse modelo computacional  
é baseado num sistema de  
equações diferenciais  
(relativamente simples)

\*Diagrama por Roberto Luo. Simulador disponível em <http://www.EpidemicCode.org>

# O que vamos estudar?

# Problemas frequentes em modelagem computacional

- Equações algébricas “complicadas”
- “Grandes” sistemas lineares

$$f(x) = 0$$

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

- Derivadas “difíceis”

$$f'(x)$$

- Integrais “intratáveis”

$$\int_a^b f(x) dx$$

- Curvas que “aproximam” dados

$$A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$$

- Equações diferenciais “complexas”

$$\partial_t u = F(u, \partial_x u, \partial_{xx} u, \dots, x, t)$$



# Problemas frequentes em modelagem computacional

- Equações algébricas “complicadas”
- “Grandes” sistemas lineares

$$f(x) = 0$$

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

- Derivadas “difíceis”

$$f'(x)$$

- Integrais “intratáveis”

$$\int_a^b f(x) dx$$

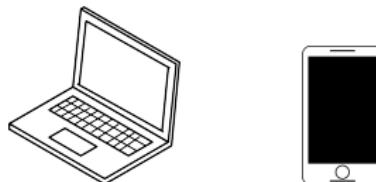
- Curvas que “aproximam” dados

$$A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$$

- Equações diferenciais “complexas”

$$\partial_t u = F(u, \partial_x u, \partial_{xx} u, \dots, x, t)$$

**Esses problemas podem ser resolvidos num computador!**



## Como citar esse material?

A. Cunha, *Métodos Numéricos e Computacionais em Ciências e Engenharias*, Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ, 2020.

Essas notas de aula podem ser compartilhadas nos termos da licença Creative Commons BY-NC-ND 3.0, com propósitos exclusivamente educacionais.

