

Métodos Numéricos e Computacionais em Ciências e Engenharias

Prof. Americo Cunha

Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ

americocunha@uerj.br

www.americocunha.org



 @AmericoCunhaJr

 @AmericoCunhaJr

 @AmericoCunhaJr



Os quatro paradigmas da ciência

1. Ciência Experimental

- ~ 1000 anos
- descrição de fenômenos naturais via observação empírica

2. Ciência Teórica

- ~ 400 anos
- generalizações via equações matemáticas

3. Ciência Computacional

- ~ 60 anos
- exploração de fenômenos complexos via computação

4. Ciência de Dados

- ~ 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

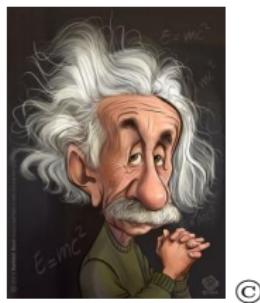


Modelos: idealizações (simplificações) da realidade

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

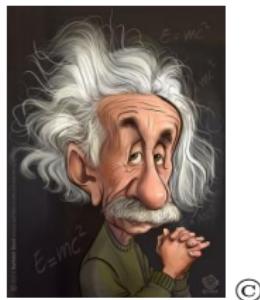
© Figura obtida em: <https://br.pinterest.com/pin/257197828695866478>

Modelos: idealizações (simplificações) da realidade

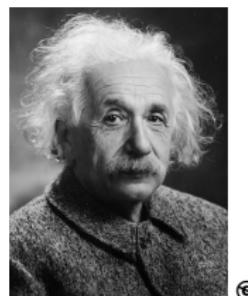
A realidade é complexa demais para ser entendida em todos os seus detalhes, sendo parcialmente compreendida com o auxílio dos mais diversos tipos de modelos

Modelo \neq Realidade

Modelo = Caricatura da Realidade



modelo

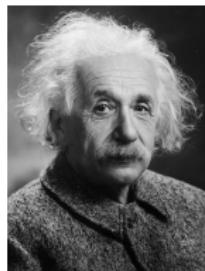


realidade

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

Para toda realidade, vários modelos são possíveis

Albert Einstein

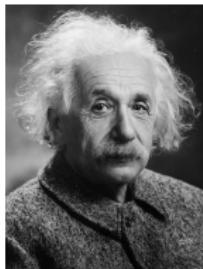


④



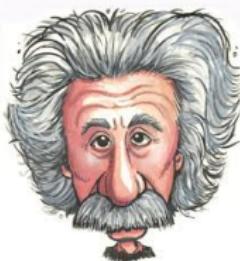
Para toda realidade, vários modelos são possíveis

Albert Einstein

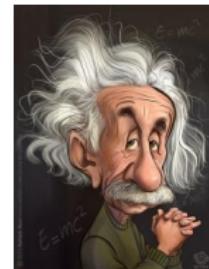


©

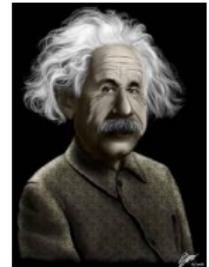
Caricaturas de Albert Einstein



©



©



©

© Figuras obtidas em:

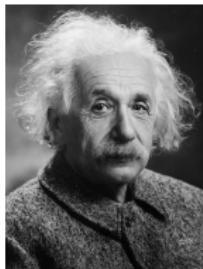
<https://www.aboutfacesentertainment.com/pages/einstein-caricatures.html>

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

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

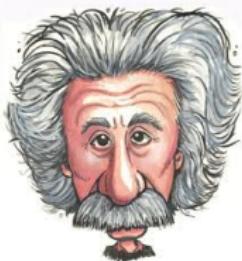
Para toda realidade, vários modelos são possíveis

Albert Einstein

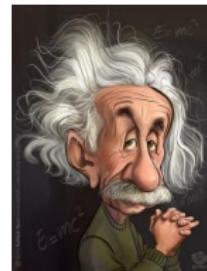


©

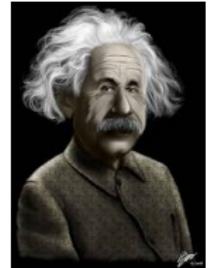
Caricaturas de Albert Einstein



©



©



©

Um bom modelo captura as principais características da realidade de interesse

© Figuras obtidas em:

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

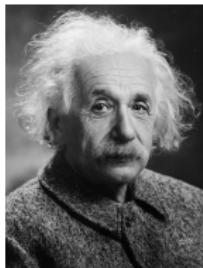
<https://br.pinterest.com/pin/257197828695866478>

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



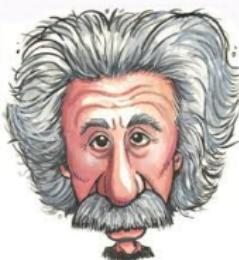
Para toda realidade, vários modelos são possíveis

Albert Einstein

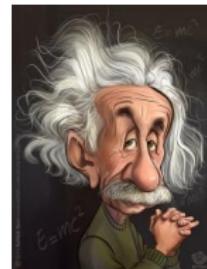


©

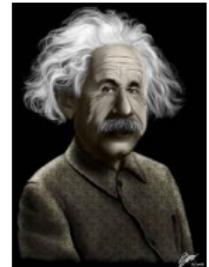
Caricaturas de Albert Einstein



©



©



©

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...



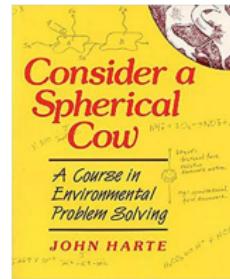
© ⓘ ⓘ ⓘ

*"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://me.me/i/forbidden-mango-54a41b7843ca4bf38fc5cf5e0ea396d2> ©

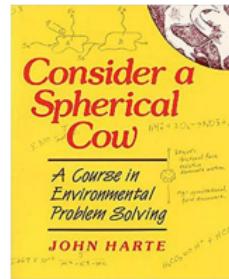
Exemplo da manga sugerido pelo Prof. Augusto Barbosa (UERJ).

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:

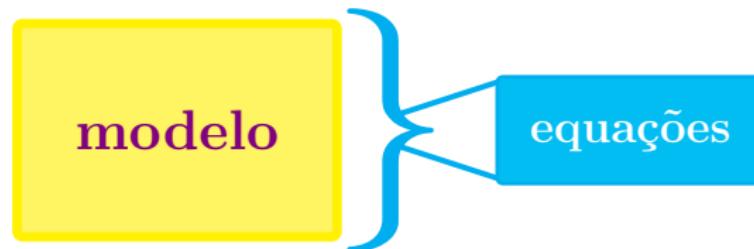
https://en.wikipedia.org/wiki/George_E._P._Box

<https://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:

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

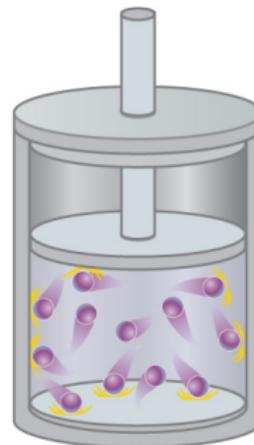


Figura adaptada de <http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@09.110> CC BY-NC-SA

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:

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

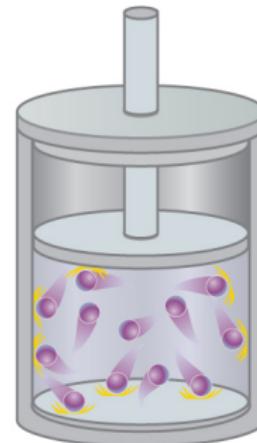


Figura adaptada de <http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@09.110> CC BY-NC-SA

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:

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

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

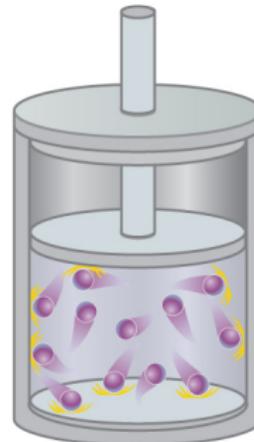


Figura adaptada de <http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@09.110> CC BY-NC-SA

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:

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

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

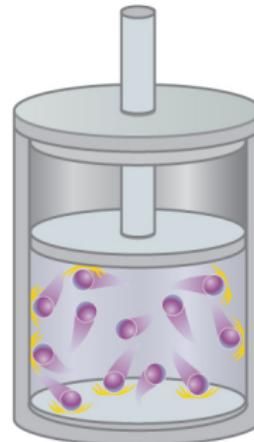


Figura adaptada de <http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@09.110> CC BY-NC-SA

Equação de estado de um gás

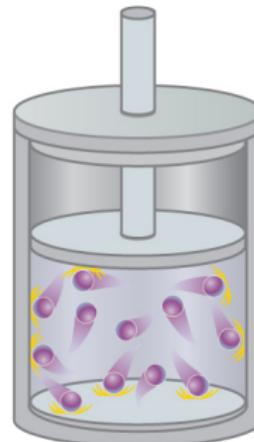
Lei dos gases ideais:

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

Equação de Van der Waals:

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

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



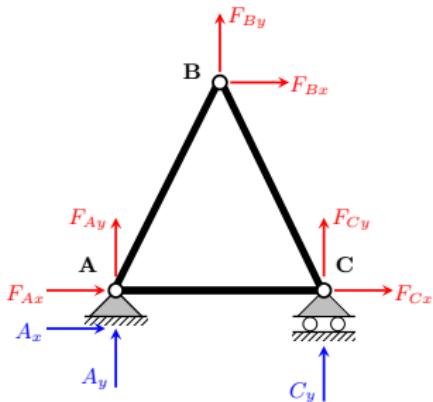
CC BY SA

Equações algébricas desse tipo são “complicadas”!



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

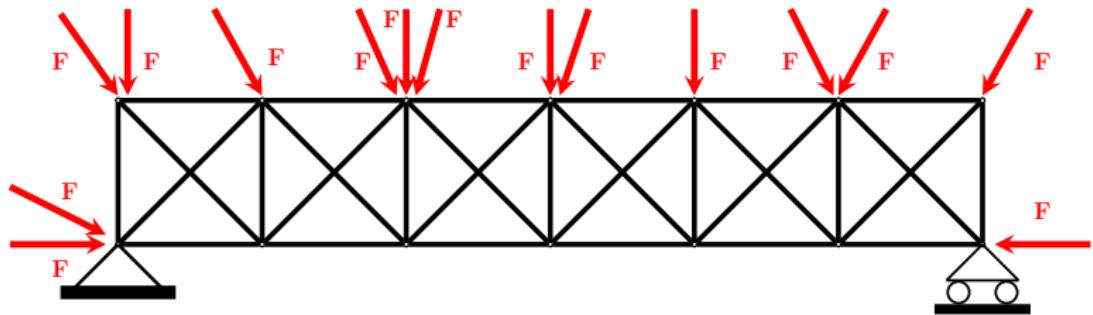
Análise estrutural



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.

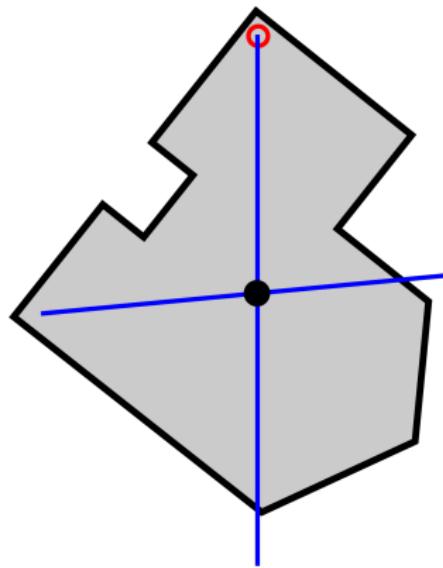


Para estruturas complexas o equilíbrio mecânico produz um sistema linear “grande”



* Figura elaborada por Marcos Vinicius Issa

Centróide de geometrias complexas

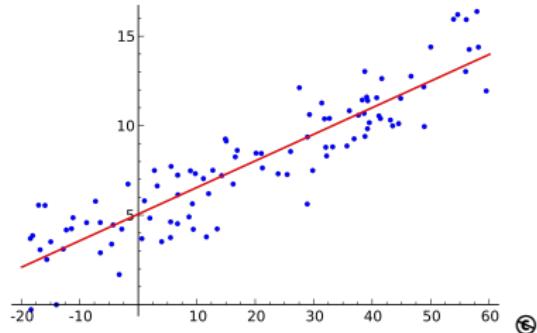


$$\bar{x} = \frac{1}{A(\mathcal{R})} \int_{\mathcal{R}} x \, dA$$

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

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

Curvas de tendência

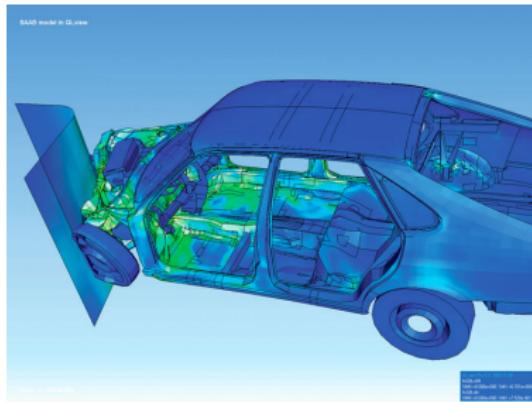


Curvas que “aproximam” dados vem de sistemas lineares retangulares, que em geral não tem solução!



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

Elastodinâmica de veículos terrestres



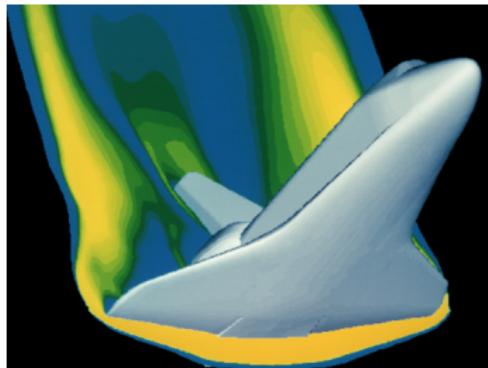
$$\begin{aligned}\rho \ddot{\mathbf{u}} + c \dot{\mathbf{u}} &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}^T \\ \boldsymbol{\epsilon} &= \mathcal{G}(\nabla \mathbf{u}) \\ \boldsymbol{\sigma} &= \mathcal{C}(\boldsymbol{\epsilon})\end{aligned}$$

- + 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



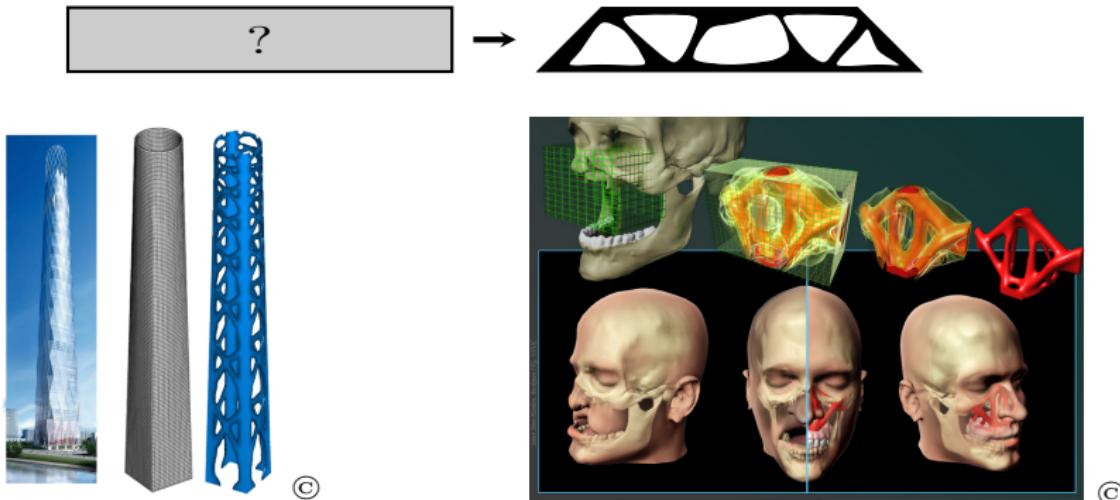
$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} \\ \boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}^T \\ \boldsymbol{\sigma}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

+ condições de contorno
+ condições iniciais

Ingredientes desse modelo computacional:

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

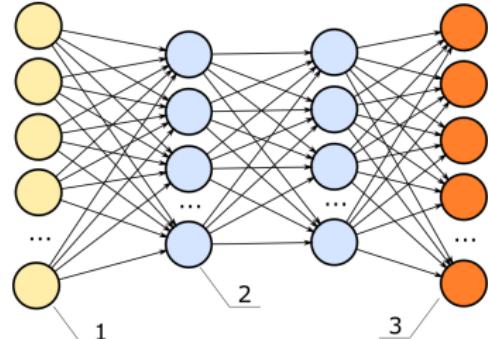
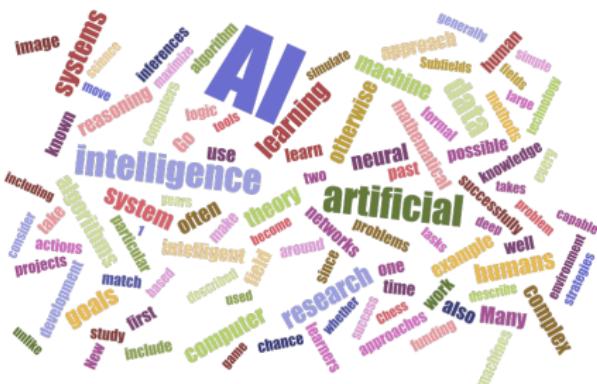
Otimização topológica em sistemas de engenharia



Ingredientes do processo de otimização:

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

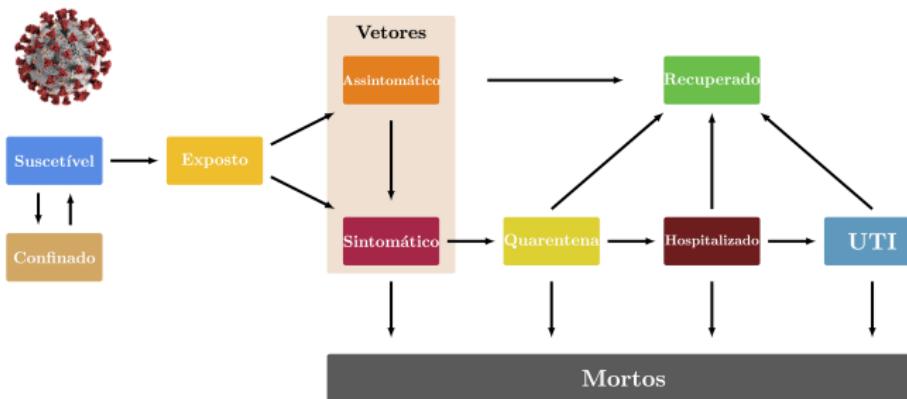
Inteligência artificial e aprendizado de máquina



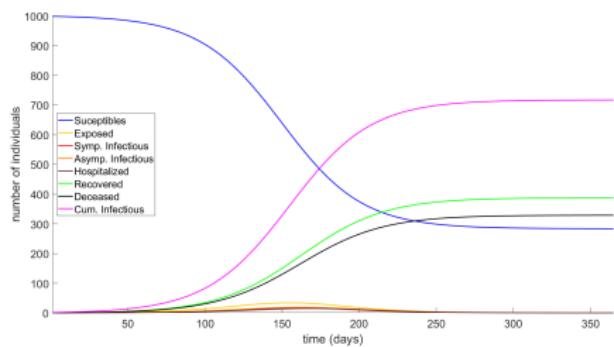
Ingredientes do treinamento (aprendizado):

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

Propagação de uma epidemia



EPIDEMIC
EPIDEMIOLOGY EDUCATIONAL CODE



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”

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

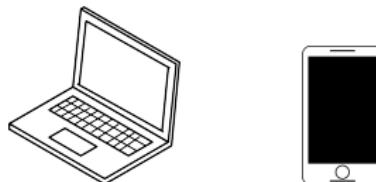
- Curvas que “aproximam” dados

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

- 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.



@AmericoCunhaJr



@AmericoCunhaJr

@AmericoCunhaJr

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

