Métodos Numéricos e Computacionais em Ciências e Engenharias

Prof. Americo Cunha

Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ

americo.cunha@uerj.br

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

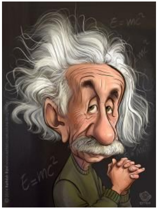
Modelo $=$ Caricatura da Realidade

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

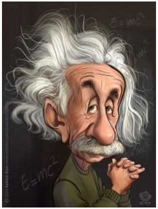
© Figura obtida em: https://br.pinterest.com/pin/257197828695866478

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

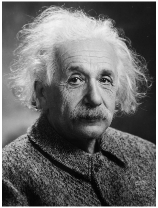
Modelo $\neq$ Realidade

Modelo = Caricatura da Realidade



©

modelo

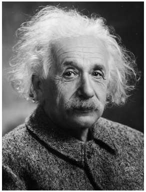


realidade

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

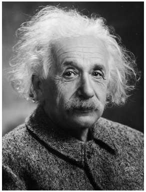
Para toda realidade, vários modelos são possíveis

Albert Einstein

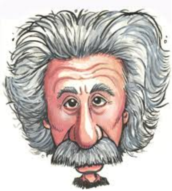


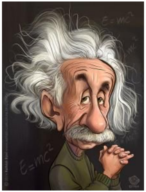
Para toda realidade, vários modelos são possíveis

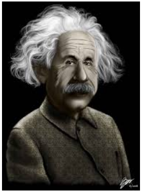
Albert Einstein



Caricaturas de Albert Einstein

 ©

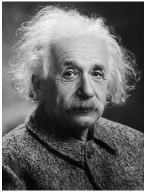
 ©

 ©

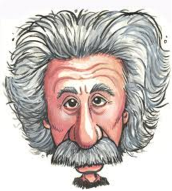
© Figuras obtidas em:
https://www.aboutfacesentertainment.com/pages/einstein-caricatures.html
https://br.pinterest.com/pin/257197828695866478
https://br.pinterest.com/pin/475200198161710508

Para toda realidade, vários modelos são possíveis

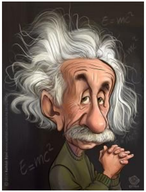
Albert Einstein



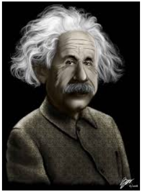
Caricaturas de Albert Einstein



©



©



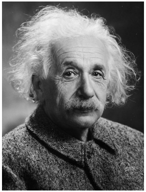
©

Um bom modelo captura as principais características da realidade de interesse

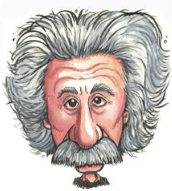
© Figuras obtidas em:
https://www.aboutfacesentertainment.com/pages/einstein-caricatures.html
https://br.pinterest.com/pin/257197828695866478
https://br.pinterest.com/pin/475200198161710508

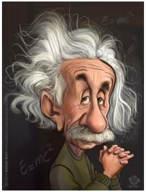
Para toda realidade, vários modelos são possíveis

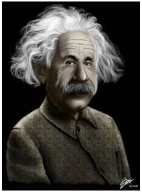
Albert Einstein



Caricaturas de Albert Einstein





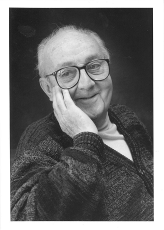


Um bom modelo captura as principais características da realidade de interesse

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...



🅭🅯🄏🄌

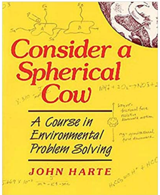
"All models are wrong but some are useful"

George E. P. Box

Não pense num modelo como certo ou errado...

"All models are wrong but some are useful"

George E. P. Box

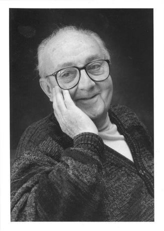


Forbidden Mango ©

Figuras obtidas em:
https://en.wikipedia.org/wiki/George_E._P._Box
https://me.me/i/forbidden-mango-54a41b7843ca4bf38fc5cf5e0ea396d2 ©

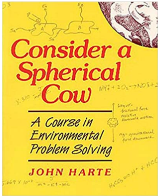
Exemplo da manga sugerido pelo Prof. Augusto Barbosa (UERJ).

Não pense num modelo como certo ou errado...



"All models are wrong but some are useful"

George E. P. Box



Forbidden Mango

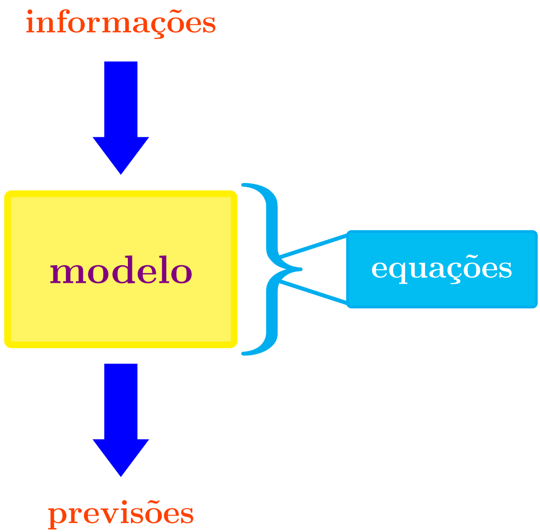
©

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



* 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:

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

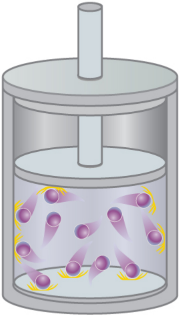


Figura adaptada de http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@9.110

Equação de estado de um gás

Lei dos gases ideais:

$$\boxed{P\,V = n\,R\,T} \quad \Longrightarrow \quad V = \frac{n\,R\,T}{P}$$

Equação de Van der Waals:

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

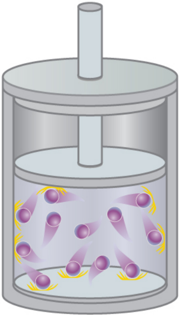


Figura adaptada de http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@9.110

Equação de estado de um gás

Lei dos gases ideais:

$$\boxed{P\,V = n\,R\,T} \quad \Longrightarrow \quad V = \frac{n\,R\,T}{P}$$

Equação de Van der Waals:

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

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

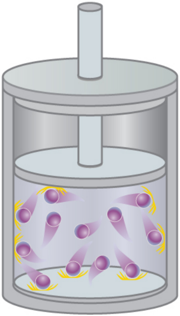


Figura adaptada de http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@9.110

Equação de estado de um gás

Lei dos gases ideais:

$$\boxed{P\,V = n\,R\,T} \quad \Longrightarrow \quad V = \frac{n\,R\,T}{P}$$

Equação de Van der Waals:

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

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

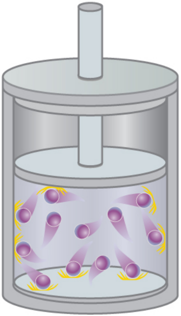
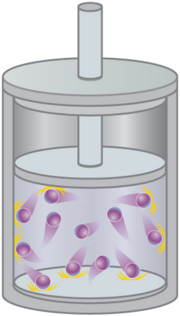


Figura adaptada de http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@9.110

Equação de estado de um gás

Lei dos gases ideais:

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



Equação de Van der Waals:

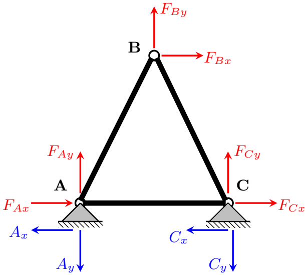
$$\left(P + a\frac{n^2}{V^2}\right)(V - n\,b) = n\,R\,T$$

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

Equações algébricas desse tipo são "complicadas"!

Figura adaptada de http://cnx.org/contents/85abf193-2bd2-4908-8563-90b8a7ac8df6@9.110

Análise estrutural

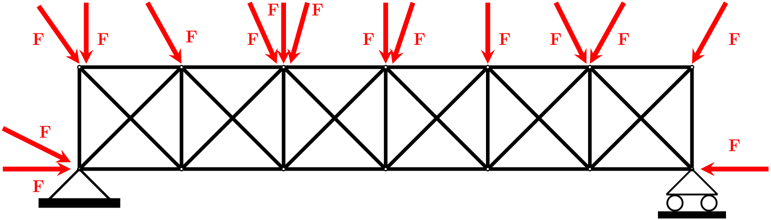


Equilíbrio mecânico:

$$
\begin{bmatrix}
\cos\alpha & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
\sin\alpha & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
-\cos\alpha & 0 & \cos\beta & 0 & 0 & 0 \\
-\sin\alpha & 0 & -\sin\beta & 0 & 0 & 0 \\
0 & -1 & -\cos\beta & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \sin\beta & 0 & 0 & 1
\end{bmatrix}
\begin{Bmatrix} AB \\ AC \\ BC \\ A_x \\ A_y \\ C_y \end{Bmatrix}
=
\begin{Bmatrix} -F_{Ax} \\ -F_{Ay} \\ -F_{Bx} \\ -F_{By} \\ -F_{Cx} \\ -F_{Cy} \end{Bmatrix}
$$

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

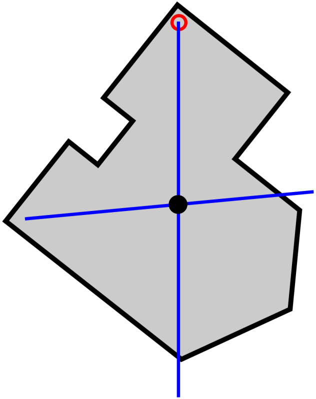
Análise estrutural



Para estruturas complexas o equilíbrio mecânico produz um sistema linear "grande"

* Figura elaborada por Marcos Vinicius Issa

Centróide de geometrias complexas

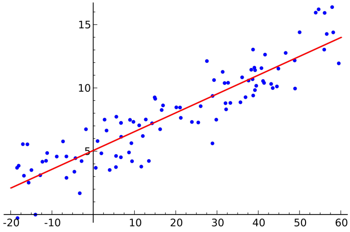


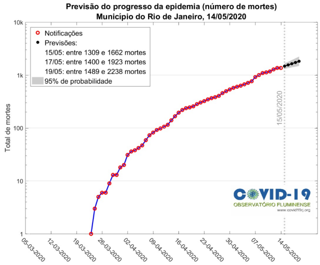
$$\overline{x} = \frac{1}{A(\mathcal{R})} \int_{\mathcal{R}} x \, dA$$

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

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

Curvas de tendência

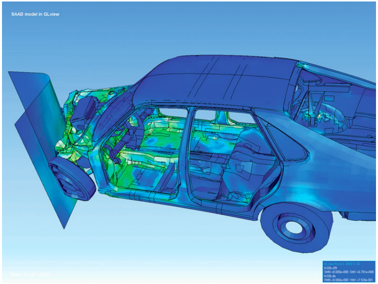




Curvas que "aproximam" dados vem de sistemas lineares retangulares, que em geral não tem solução!

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

Elastodinâmica de veículos terrestres



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

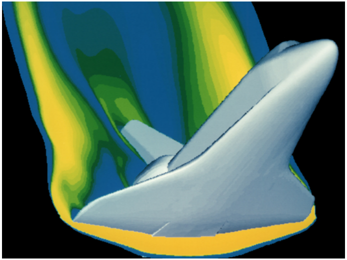
$+$ condições de contorno

$+$ condições iniciais

Ingredientes desse modelo computacional:

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

Aerodinâmica de veículos aeroespaciais



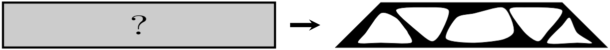
$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\, \mathbf{u}) &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial t}(\rho\, \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho\, \mathbf{u}\, \mathbf{u}) &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho\, \mathbf{g} \\
\boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}^T \\
\boldsymbol{\sigma}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

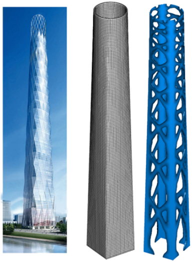
$+$ condições de contorno
$+$ condições iniciais

Ingredientes desse modelo computacional:

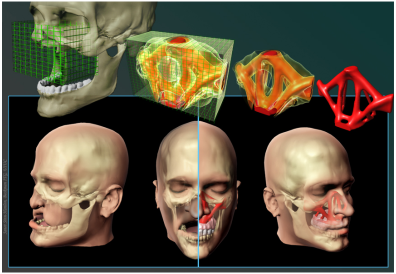
- **equações diferencais "complexas"**
- **integrais "intratáveis"**
- **"grandes" sistemas algébricos (lineares e não lineares)**

Otimização topológica em sistemas de engenharia





©



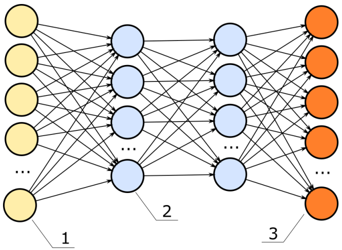
©

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

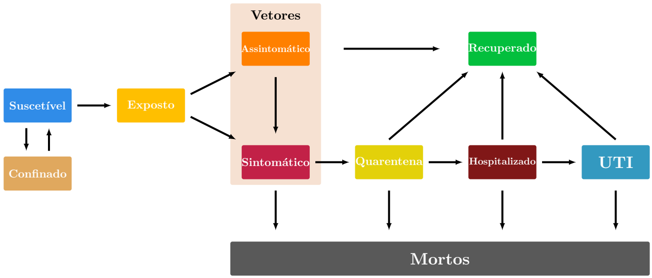


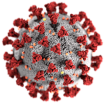
Ingredientes do treinamento (aprendizado):

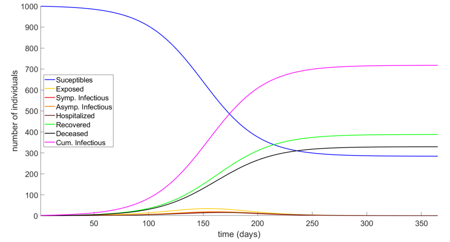
- **problema de otimização (cálculo de derivadas)**
- **solução de sistemas lineares retangulares**

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

Propagação de uma epidemia







Esse modelo computacional é baseado num sistema de equações diferencais (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"

$$f(x) = 0$$

- "Grandes" sistemas lineares

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

- 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"

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

Problemas frequentes em modelagem computacional

- Equações algébricas “complicadas”

$$f(x) = 0$$

- Derivadas “difíceis”

$$f'(x)$$

- Curvas que “aproximam” dados

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

- “Grandes” sistemas lineares

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

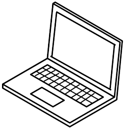
- Integrais “intratáveis”

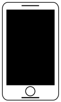
$$\int_a^b f(x)\,dx$$

- Equações diferenciais “complexas”

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

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.