AULA 2 – Revisão de alguns conceitos da computação numérica

Senhorinha F. C. F. Teixeira

Departamento de Produção e Sistemas

Escola de Engenharia

Universidade do Minho

Conteúdos

- AULA 2 – Revisão de alguns conceitos da computação numérica
    - **Conceito de iteração/processo iterativo**
    - Aproximação de funções
    - Integração de funções

Conceitos

➢ COMPUTAÇÃO NUMÉRICA

O objetivo principal de qualquer **método numérico** será o de fornecer uma **solução aproximada** (numérica) a **problemas matemáticos.**

A implementação de um método numérico está sempre ligada ao **desenvolvimento de *software***.

Conceitos

➢ **PROBLEMAS DE ENGENHARIA**

➢ **Analisar e avaliar** sistemas físicos

➢ **Usar** um conjunto de técnicas para modelar problemas físicos

➢ **Usar** ferramentas informáticas para modelar e avaliar problemas físicos

Conceito de iteração/processo iterativo

- **Caso de estudo 1**: resolução numérica de uma equação não linear
- **Caso de estudo 2**: resolução numérica de um sistema linear
- **Caso de estudo 3**: resolução de um sistema não linear

Processo iterativo

Os métodos numéricos usados geralmente são **métodos iterativos**.

1. Estimativa Inicial
2. Fórmula Iterativa
3. Erro da Iteração
4. Critério de Paragem
5. Convergência

Estimativa inicial

É a melhor aproximação à solução.

Como é conseguida?

a) Outro problema semelhante
b) Modelo mais simples
c) Método menos preciso
d) Método gráfico (quando possível)

Fórmula iterativa

$$x_n = g_n\left(x_{n-1},\ldots\ldots x_{n-s}\right)$$

$$n = s, s+1,\ldots$$

O valor aproximado da iteração n (x_n) é função dos valores aproximados das iterações anteriores (x_{n-1} , x_{n-2} , ...)

Erro do processo iterativo

Normalmente, indica-se o **erro da aproximação** como sendo a diferença entre duas aproximações sucessivas à solução.

Este erro pode ser medido em termos ABSOLUTO ou RELATIVO:

Erro Absoluto $|x_{n+1} - x_n|$

Erro Relativo $\dfrac{|x_{n+1} - x_n|}{|x_{n+1}|}$

Avaliação dos resultados

O processo iterativo é repetido até se obter uma determinada **precisão**, definida pelo utilizador. Esta precisão chama-se o **critério de paragem** do processo iterativo.

Possíveis Critérios:

1. Erro da Aproximação
2. Valor de f(x)
3. Número de Iterações

Caso de estudo ENL

O estudo do escoamento de fluidos em tubos é um problema com variadas aplicações em muitas áreas de engenharia e ciência.

A título de exemplo, pode-se falar no escoamento de líquidos ou gases em condutas de arrefecimento ou em gasodutos. Cientistas estão interessados em estudar por exemplo, o escoamento do sangue nas artérias.

A resistência ao escoamento nestas condições é parametrizada por um número adimensional chamado o fator de atrito, f_a. Para escoamentos turbulentos, a equação de Colebrook permite calcular este valor:

$$0 = \frac{1}{\sqrt{f_a}} + 2.0 \log\left(\frac{\varepsilon}{3.7\,D} + \frac{2.51}{\mathrm{Re}\sqrt{f_a}}\right)$$

Caso de estudo ENL

$$0 = \frac{1}{\sqrt{f_a}} + 2.0 \log\left(\frac{\varepsilon}{3.7\,D} + \frac{2.51}{\mathrm{Re}\,\sqrt{f_a}}\right)$$

em que ε é a rugosidade da conduta *(m)*, *D* é o diâmetro (m) e *Re* é o nº de Reynolds.

Considere ar a passar num tubo fino e calcule o fator de atrito.

Caso de estudo ENL

Considere os seguintes dados para poder resolver o problema:

$$\mathrm{Re} = (\rho V D)/\mu$$

onde

ρ é a massa volúmica do fluido (kg/m^3)

V é a velocidade (m/s)

μ é a viscosidade dinâmica $(N.s/m^2)$

$$\rho = 1.23 kg/m^3$$

$$\mu = 1.79 \times 10^{-5}\, N.s/m^2$$

$$D = 0.005\, m$$

$$V = 40\, m/s$$

$$\varepsilon = 0.0015 m$$

Caso de estudo ENL

Uma boa estimativa para o valor de f_a pode ser calculada através da seguinte equação:

$$f_a = \frac{1.325}{\left[\ln\left(\frac{\varepsilon}{3.7D} + \frac{5.74}{\mathrm{Re}^{0.9}}\right)\right]^2}$$

OU:

(MATLAB) Faça o gráfico da função e estime a aproximação inicial.

Caso de estudo ENL

Duas formas de resolver o problema:

(Calculadora)

Utilize um método iterativo que não recorre ao cálculo de derivadas.

Faça duas iterações e apresente uma estimativa do erro relativo.

(MATLAB) Utilize a função mais adequada com $TolX = 1 \times 10^{-6}$

Caso de estudo SNL

A concentração de um poluente num lago depende do tempo t e é dada por

$$C(t) = 70\,e^{\beta t} + 20\,e^{\omega t}\,.$$

Efetuaram-se duas medições da concentração que foram registadas na seguinte tabela

t	1	2
$C(t)$	27.5702	17.6567

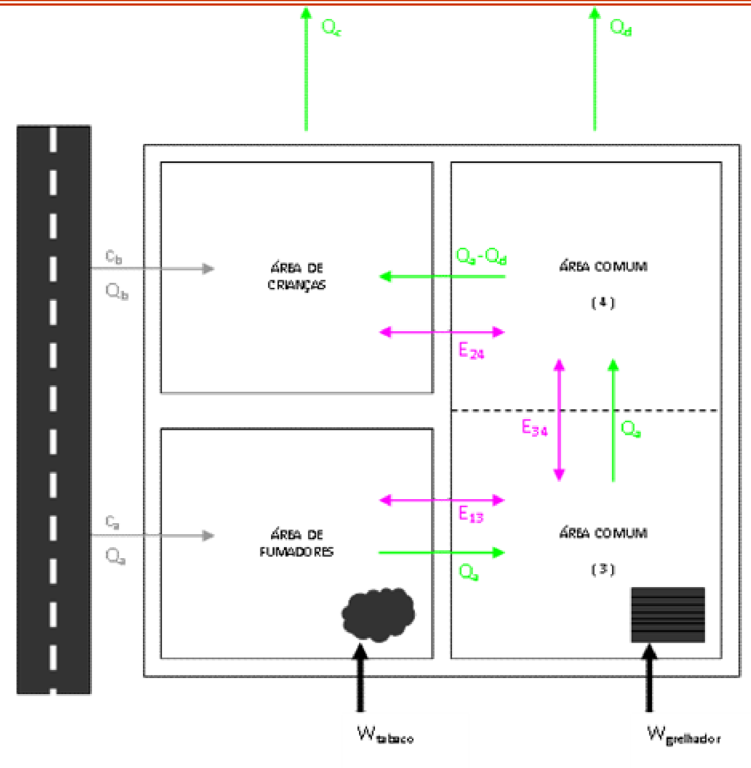
Utilize o método de Newton para determinar β e ω. Considere a aproximação inicial $(\beta,\omega)^{(1)} = (-1.9, -0.15)$. Implemente um iteração e apresente um estimativa do erro relativo da aproximação calculada.

Caso de estudo SL

Vista geral das várias áreas do restaurante e da estrada, bem como, do sistema de ventilação implementado.

Existem duas salas distintas para crianças e fumadores e uma área comum.
A área de fumadores e a zona (3) da sala comum tem fontes de monóxido de carbono devido ao fumo do tabaco (W_{tabaco}) e ao grelhador sem ventilação ($W_{grelhador}$). As salas (1) e (2) tem entradas de ar (infelizmente estão posicionadas do lado da estrada) com pequenas concentrações de monóxido de carbono (c_a e c_b).

As setas com dois sentidos (E_{13}, E_{34} e E_{24}) representam mistura difusiva e as setas só num sentido (Q_a, Q_b, Q_c, Q_d e Q_a-Q_d) representam fluxos volumétricos.



Caso de estudo SL

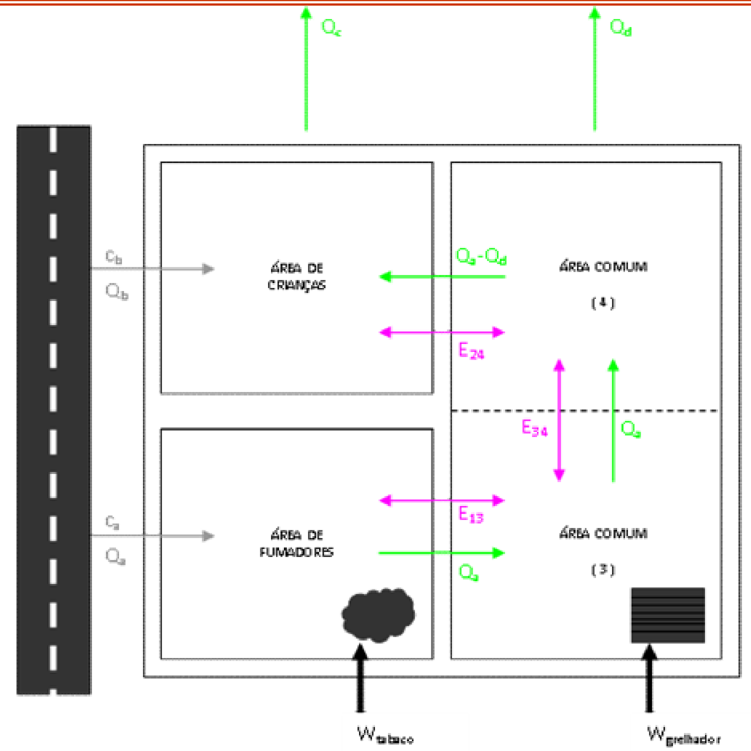
Obtêm-se assim um sistema de equações lineares em (c's) para calcular a concentração de monóxido de carbono em cada sala

Sala 1: $W_{tabaco} + Q_a c_a - Q_a c_1 + E_{13}(c_3 - c_1) = 0$

Sala 2: $Q_b c_b + (Q_a - Q_d)c_4 - Q_c c_2 + E_{24}(c_4 - c_2) = 0$

Sala 3: $W_{grelhador} + Q_a c_1 - Q_a c_3 + E_{13}(c_1 - c_3) + E_{34}(c_4 - c_3) = 0$

Sala 4: $Q_a c_3 - Q_a c_4 + E_{34}(c_3 - c_4) + E_{24}(c_2 - c_4) = 0$



Caso de estudo SL

Considere os seguintes dados para poder resolver o problema:

W_{tabaco}= 1000mg/hr; $W_{grelhador}$=2000mg/hr;

$c_a = c_b$= 2mg/m^3;

E_{13}= 25 m^3/hr; E_{34} = 50 m^3/hr; E_{24} = 25 m^3/hr;

Q_a= 200 m^3/hr; Q_b = 50 m^3/hr; Q_c = 150 m^3/hr e Q_d=100 m^3/hr.

Método de Gauss-Seidel

Se pensarmos num sistema de 3x3, podemos resolver as equações de modo a calcular cada uma das incógnitas:

$$x_1 = \frac{b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3}{a_{11}}$$

$$x_2 = \frac{b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3}{a_{22}}$$

$$x_3 = \frac{b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2}{a_{33}}$$

Podemos começar este processo iterativo, assumindo que as 3 variáveis são zero.

Começamos por substituir na equação de x_1. Depois com este novo valor calculado e com o $x_3=0$, podemos calcular um novo x_2. ….

Assim, cada valor novo de *x* calculado, ele é imediatamente usado no cálculo do seguinte. Assim, estamos sempre a trabalhar com as ‘melhores estimativas.

Caso de estudo SL

Duas formas de resolver o problema:

a) **(calculadora)** Resolva o sistema de equações linear utilizando um método iterativo Gauss-Seidel (faça apenas duas iterações). Para que valor iria convergir a solução?

b) **(MATLAB)** Resolva o sistema, usando um método direto.

Conteúdos

- AULA 2 – Revisão de alguns conceitos da computação numérica
  - Conceito de iteração/processo iterativo
  - **Aproximação de funções**
  - Integração de funções

Aproximação de funções

Pretende-se estudar métodos numéricos que podem aproximar **funções definidas** não de forma contínua mas de **forma discreta apenas num conjunto de pontos (x_i, y_i).**

Pode falar-se de duas formas de aproximação de funções definidas por pontos:

1. **aproximação exata** (em que para um dado nº de pontos vamos fazer passar um modelo normalmente um polinómio por esses pontos e assim, nesses pontos o erro da aproximação é nulo)

2. **aproximação não exata** (vamos encontrar um modelo que vai aproximar o melhor possível a função definida por pontos, não passando necessariamente nos pontos mas próximo deles).

Aproximação não exata MQ linear

Para grandes conjuntos de dados e especialmente nos casos de dados tabelados não exatos, interessa calcular uma função aproximação que sem ter de passar exatamente pelos pontos, dê o melhor ajuste a esses dados, mostrando assim a sua tendência geral.

O critério mais usado para encontrar a **melhor curva** que aproxima os dados é o **Critério dos Mínimos Quadrados**:

$$\min \quad S = \sum_{i=1}^{m} \left(f_i - M(x_i) \right)^2$$

Caso de estudo MQ linear

In an electrophoretic fiber-making process, the diameter of the fiber, d, is related to the current flow, I. the following variables are measured during production:

I (nA)	300	300	350	400	400	500	500	650	650
d (μm)	22	26	27	30	34	33	33.5	37	42

The relationship between the current and the diameter can be modeled with an equation of the form

$$d = a + b\sqrt{I}$$

Use the data to determine the constants a and b that best fit the data.

Caso de estudo MQ linear

Sugestões de trabalho:

(MATLAB) Determine o modelo que melhor se ajusta aos valores da tabela.

Represente os pontos e o modelo no mesmo gráfico e comente.

Utilize o modelo calculado para obter uma estimativa do valor do diâmetro para 600 nA.

Caso de estudo MQ linear

É possível agora calcular o **erro da aproximação** comparando os valores de f_i e respetivos valores de $M(x_i)$ para os pontos tabelados :

$$\mathbf{erro} = \sum_{i=1}^{m} \left(f_i - M\left(x_i\right)\right)^2$$

Conteúdos

- AULA 2 – Revisão de alguns conceitos da computação numérica
  - Conceito de iteração/processo iterativo
  - Aproximação de funções
  - **Integração de funções**

Integração de funções

O processo de integração é o inverso do de diferenciação e pode ser representado por:

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

$f(x)$ será a função a integrar e o integral pode ser interpretado como a área abaixo da curva $f(x)$ entre a e b .

Integração de funções

As fórmulas de integração numéricas são deduzidas em dois passos:

1. Aproximação da função definida por pontos por uma função de interpolação (Polinómios)

2. Integração da função aproximação

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_n(x)dx$$

Caso de estudo integração

Estes dados foram coletados na secção transversal de um rio (*y* = distância à margem, *H* = profundidade e *U* = velocidade):

y, m	0	1	3	5	7	8	9	10
H, m	0	1	1.5	3	3.5	3.2	2	0
U, m/s	0	0.1	0.12	0.2	0.25	0.3	0.15	0

Use integração numérica para calcular: a) A profundidade média, b) A área da secção transversal, c) A velocidade média, d) O escoamento.

Note que a área transversal (A_c) e o escoamento (Q) podem ser calculados como :

$$A_c = \int_0^y H(y)\,dy \qquad\qquad Q = \int_0^y H(y)U(y)\,dy$$