SOLUÇÕES EM COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA

📅 Cronograma Básico do Curso

Encontro	Data	Módulo
1	23/08/2025	Módulo 1: Boas-vindas, fundamentos históricos e filosóficos da Computação e Modelagem
2	30/08/2025	Módulo 2: Zeros de funções e Raízes de Equações não Lineares
3	06/09/2025	Módulo 2: Zeros de funções e Raízes de Equações não Lineares
4	13/09/2025	Módulo 2: Zeros de funções e Raízes de Equações não Lineares
5	20/09/2025	Módulo 3: Sistemas lineares – Álgebra computacional e solução Numérica de Equações
6	04/10/2025	Módulo 3: Sistemas lineares – Álgebra computacional e solução Numérica de Equações
7	11/10/2025	Módulo 3: Sistemas lineares – Álgebra computacional e solução Numérica de Equações
8	18/10/2025	Módulo 4: Otimização – Fundamentos, Algoritmos e Aplicações
9	25/10/2025	Módulo 4: Otimização – Fundamentos, Algoritmos e Aplicações
10	01/11/2025	Módulo 4: Otimização – Fundamentos, Algoritmos e Aplicações
11	08/11/2025	Módulo 5: Ajustes de Curvas – Regressões, Interpolações e Aplicações
12	15/11/2025	Módulo 5: Ajustes de Curvas – Regressões, Interpolações e Aplicações
13	22/11/2025	Módulo 6: Integração numérica – Teoria, Métodos e Aplicações
14	29/11/2025	Módulo 7: Equações Diferenciais Ordinárias – Modelagem, Métodos e Aplicações
15	06/12/2025	Módulo 7: Equações Diferenciais Ordinárias – Modelagem, Métodos e Aplicações
16	13/12/2025	Módulo 8: Equações Diferenciais Parciais – Modelagem, Discretização e Simulação Computacional
17	20/12/2025	Módulo 8: Equações Diferenciais Parciais – Modelagem, Discretização e Simulação Computacional

🧱 Módulo 1 — Boas-vindas, Fundamentos Históricos e Filosóficos da Computação e Modelagem

Duração prevista: 1 encontro (23/08/2025)

📅 **Data do encontro: 23/08/2025**

🧠 **Assunto principal: Introdução ao curso, fundamentos históricos e filosóficos dos métodos numéricos e da computação científica**

📚 **Tópicos abordados:**

- Apresentação geral do curso e da proposta pedagógica
- Breve história dos métodos numéricos e sua importância no desenvolvimento da engenharia moderna
- Fundamentos da computação:
  - Quebra da abstração do funcionamento de um computador
  - Circuitos digitais, álgebra booleana e lógica de transistores
  - Como um computador lida com números: ponto flutuante e representação binária
  - Comparação de linguagens: desempenho computacional e uso em métodos numéricos
  - Introdução à ideia de compiladores e interpretação de código
- Reflexão: por que precisamos de métodos numéricos?
- Exemplo motivador:
  - Esfera sedimentando em fluido viscoso com baixo Reynolds
  - Inclusão progressiva de termos nas forças hidrodinâmicas e complexificação do modelo
  - Discussão sobre limites da solução analítica e necessidade da simulação
  - Introdução à ideia de validação e modelagem com fidelidade progressiva

🗣️ **Observação:**

Esse encontro será usado também para inspirar a turma, fortalecer o senso de propósito do curso e criar uma ponte entre história, filosofia e a prática moderna de aspectos de computação científica.

🧮 Módulo 2 — Zeros de Funções e Raízes de Equações Não Lineares

Duração prevista: 3 encontros (30/08, 06/09, 13/09)

📅 **Datas dos encontros:**

- **30/08/2025**
- **06/09/2025**
- **13/09/2025**

🧠 **Assunto principal: Métodos numéricos para determinação de raízes de funções algébricas e transcendentais**

📚 **Tópicos abordados:**

1. Introdução teórica:

- Significado de encontrar **zeros de função**
- Importância na engenharia e nas ciências aplicadas
- Diferença entre **funções algébricas** e **transcendentais**
- Contextualização histórica e filosófica do problema da "raiz" de uma equação

2. Métodos clássicos e progressivamente mais robustos:

- Método da **bissecção**
- Método da **falsa posição (regula falsi)**
- Método da **falsa posição modificado**
- Método de **Newton-Raphson**
  - Dedução teórica e interpretação geométrica
  - Convergência quadrática
- Método da **secante**
- Método da **secante modificada**
- Discussão sobre **raízes múltiplas**
  - Newton-Raphson modificado para múltiplas raízes

3. Sistemas não lineares:

- Generalização do método de Newton-Raphson para **sistemas de equações não lineares**
- Linearização via série de Taylor
- Introdução ao **jacobiano** e sua interpretação

4. Métodos específicos para polinômios:

- Método de **Müller**
- Conceito e uso da **deflação polinomial**
  - Aplicação prática após encontrar raízes conhecidas
- Algoritmo de Briot-Ruffini
  - Implementação manual e interpretação simbólica
- Método de **Bairstow** e fractais de Bairstow
  - Aplicação para encontrar raízes complexas
  - Discussão sobre convergência e limitações

5. Estudos de caso aplicados:

- Exemplo clássico: **escoamento em canal com ressalto hidráulico**
- Problema de **circuito elétrico** com elementos não lineares (diodo, por exemplo)
- Discussão sobre estabilidade de métodos em casos práticos

🧩 **Observações:**

- Esse módulo oferece a base para muitos métodos futuros, pois encontrar raízes é um passo essencial na resolução de sistemas, otimização e simulações físicas.
- O objetivo é não só ensinar as fórmulas, mas despertar a sensibilidade dos alunos para a escolha do método mais apropriado dependendo da função e do contexto.

🧮 Módulo 3 — Sistemas Lineares: Álgebra Computacional e Solução Numérica de Equações

Duração prevista: 3 encontros (20/09, 27/09, 04/10)

📅 **Datas dos encontros:**

- **20/09/2025**
- **04/10/2025**
- **11/10/2025**

🧠 **Assunto principal: Métodos diretos e iterativos para solução de sistemas lineares, com ênfase em algoritmos, custo computacional e matrizes especiais**

📚 **Tópicos abordados:**

1. Fundamentos e terminologia:

- Revisão de sistemas de equações lineares
- Representação matricial: [A].{x} = {b}
- Tipos de matrizes:
    - Diagonais
    - Tridiagonais
    - Simétricas
    - Matrizes de banda
    - Triangulares superiores/inferiores
- Introdução com sistema de 2 equações e 2 incógnitas
    - Interpretação **gráfica** e ligação com espaço vetorial

2. Métodos diretos e determinantes:

- **Determinantes** e **regra de Cramer** (motivação teórica e custo computacional)
- Limitações práticas: complexidade de cálculo para grandes ordens

3. Eliminação de variáveis e algoritmos clássicos:

- **Eliminação de Gauss** (versão ingênua)
    - Apresentação formal do algoritmo
    - Contagem de operações: FLOPs e análise de complexidade computacional
- **Problemas da eliminação gaussiana ingênua**

        - Estabilidade numérica e erro de arredondamento
    - **Pivotamento:**
        - Parcial
        - Completo
        - Impacto no condicionamento e estabilidade

4. Condicionamento e estabilidade:

- Conceito de **número de condição**
- Interpretação física e computacional
- Sensibilidade da solução a pequenas perturbações

5. Outras técnicas diretas:

- **Método de Gauss-Jordan**
- **Decomposição LU:**
    - Interpretação algébrica da eliminação gaussiana
    - Relação com cálculo de determinantes
    - Inversão matricial via L.U
    - Decomposição de Crout
- Matrizes especiais:
    - **Sistemas tridiagonais** e **algoritmo de Thomas**
    - **Decomposição de Cholesky** para matrizes simétricas e positivas definidas

6. Métodos iterativos:

- Motivação e comparação com métodos diretos
- **Iteração de ponto fixo** e ligação conceitual
- **Gauss-Seidel**
    - Condições de convergência (matriz diagonal dominante, etc.)
    - Análise empírica da convergência
    - **Gauss-Seidel com relaxação**

7. Estudos de caso aplicados:

- Modelo de **reator químico contínuo (CSTR)** com múltiplas correntes e reações simultâneas — cálculo de concentrações
- Problema da **distribuição de temperatura em pastilhas combustíveis de reatores nucleares** (introdução às diferenças finitas)
    - Discretização espacial

- Formulação do sistema linear
- Discussão da simetria e da tridiagonalidade da matriz resultante

---

🧩 **Observações:**

- Esse módulo une teoria e prática, e marca a transição dos métodos pontuais (como zeros de funções) para **sistemas com múltiplas variáveis**, comuns em problemas reais.
- Servirá também como base para os próximos módulos que envolvem equações diferenciais, onde sistemas lineares surgem frequentemente após discretização.

⚙️ Módulo 4 — Otimização: Fundamentos, Algoritmos e Aplicações

Duração prevista: 3 encontros (18/10, 25/10, 01/11)

📅 **Datas dos encontros:**

- **18/10/2025**
- **25/10/2025**
- **01/11/2025**

🧠 **Assunto principal: Otimização unidimensional e multidimensional com e sem restrições, incluindo métodos clássicos, gradientes e programação linear**

📚 **Tópicos abordados:**

---

1. Fundamentos da Otimização

- O que é otimização? Por que otimizar?
- Como formular um problema de otimização
- Terminologia:
  - Variáveis de decisão
  - Função objetivo
  - Restrições (iguais e desiguais)
- Classificação dos problemas:
  - Com restrições vs. sem restrições
  - Unidimensionais vs. multidimensionais
  - Lineares vs. não-lineares
  - Determinísticos vs. estocásticos

---

2. Otimização Unidimensional Sem Restrições

- Funções unimodais
- **Método da razão áurea**
- **Interpolação quadrática**
- **Método de Newton unidimensional**
  - Derivada primeira e segunda
  - Convergência e limitações

---

3. Otimização Multidimensional Sem Restrições

▪ **Métodos diretos:**

- Discussão breve: busca exaustiva, simplex de Nelder-Mead, métodos aleatórios
- **Busca aleatória**: motivação, limitações e paralelos com metaheurísticas

▪ **Métodos baseados em gradientes:**

🔸 **Conceituação e base matemática:**

- Definição de **gradiente**: significado físico e geométrico
- **Hessiana**: interpretação, papel na curvatura local da função
- Direções de descida e superfície de nível

🔸 **Métodos numéricos:**

- **Método do Aclive Máximo (Steepest Descent)**
  - Algoritmo
  - Problema do zigue-zague
  - Estratégias de passo (linha de busca)
- **Gradientes Conjugados**
  - Algoritmo de **Fletcher-Reeves**
  - Ortogonalidade das direções de busca
  - Convergência para funções quadráticas
- **Método de Newton Multidimensional**
  - Uso da Hessiana para ajuste de curvatura
  - Complexidade e limitações
- **Método de Levenberg-Marquardt**
  - Interpolação entre métodos de Gauss-Newton e gradiente
  - Uso comum em problemas de mínimos quadrados

---

4. Otimização Multidimensional com Restrições

▪ **Programação Linear (PL):**

🔸 **Formulação:**

- Definição de problemas de PL
- Formato padrão: Maximizar c.T.x, sujeito a A.x ≤ b

🔸 **Métodos de solução:**

- Solução **gráfica** para 2 variáveis
  - Interpretação geométrica
  - Região viável e ponto ótimo
- **Método Simplex**
  - Ideia intuitiva: caminhar nos vértices da região viável
  - Algoritmo do Simplex
  - Tabelas e interpretação prática

---

5. Estudos de Caso Aplicados

1. **Engenharia Ambiental**:
   - **Minimização de custo em uma rede de tratamento de água**
   - Formulação via programação linear
2. **Engenharia Elétrica**:
   - **Problema da máxima transferência de potência**
   - Ajuste de impedâncias via métodos de otimização

🧩 **Observações:**

- Este módulo serve como ponte entre fundamentos algébricos e aplicação prática em engenharia e ciência computacional.
- Os conceitos aqui desenvolvidos dialogam com a modelagem de problemas complexos e com algoritmos usados em machine learning, controle ótimo e simulações numéricas com malhas adaptativas.

📈 Módulo 5 — Ajuste de Curvas: Regressões, Interpolações e Aplicações

Duração prevista: 2 encontros (08/11 e 15/11)

📅 **Datas dos encontros:**

- **08/11/2025**
- **15/11/2025**

🧠 **Assunto principal: Métodos de ajuste de curvas por regressão e interpolação, com aplicações em modelos reais**

📚 **Tópicos abordados:**

🔹 1. Introdução ao Ajuste de Curvas

- Diferença conceitual entre:
    - **Regressão**: aproximação com erro, modelos empíricos
    - **Interpolação**: passa exatamente pelos dados conhecidos
- Papel do ajuste de curvas na engenharia e ciência aplicada
- Revisão conceitual: por que ajustar curvas? Previsões, simulações, otimizações

---

🔹 2. Regressão via Mínimos Quadrados

- **Regressão Linear Simples**
    - Formulação analítica
    - Interpretação geométrica e estatística
    - Erro quadrático médio
- **Regressão Polinomial**
    - Construção de sistemas normais de equações
    - Relação com **sistemas lineares** (módulo 3)
    - Problemas de sobreajuste (overfitting)
- **Regressões baseadas em linearização de relações não-lineares**
    - Transformações logarítmicas e exponenciais
    - Modelos típicos:
        - **Exponencial**: y=AeBx

        - **Lei de potência**: $y=AxB$
        - **Crescimento saturado**: $y=1+Be-CxA$
    - Exemplos práticos e cuidados com transformação de variáveis

---

🔹 3. Interpolação Polinomial

- Conceito de interpolação exata
- **Polinômios de Newton (Diferenças Divididas)**
    - Forma geral
    - Construção iterativa
    - Estabilidade e eficiência
    - Comparações com polinômios de Lagrange
- Exemplos práticos de uso

🔹 4. Interpolação por Splines

- Necessidade de interpolação suave entre pontos
- **Splines lineares**: definição e construção
- **Splines cúbicas e quadráticas**
    - Condições de continuidade
    - Equações para garantir suavidade e derivadas contínuas
    - Relação com sistemas lineares (geração de matriz tridiagonal)

🔹 5. Estudos de Caso Aplicados

1. **Engenharia Química / Bioengenharia:**
    - Ajuste de curvas de **crescimento populacional**
    - Modelos logísticos e potencial para modelar crescimento de micro-organismos
2. **Engenharia Civil / Ambiental:**
    - **Estratificação térmica em lagos**
    - Ajuste de curvas a perfis de temperatura por profundidade
    - Interpolação de dados experimentais em campo

🧩 **Observações:**

- Este módulo reforça a **conexão entre dados experimentais e modelos computacionais**, servindo como ponte natural para a entrada em equações diferenciais nos módulos seguintes.
- O uso de sistemas lineares e conceitos aprendidos anteriormente se evidencia aqui, favorecendo a integração vertical dos conhecimentos.

📐 Módulo 6 — Integração Numérica: Teoria, Métodos e Aplicações

Duração prevista: 1 encontro (22/11/2025)

📅 **Data do encontro:**

- **22/11/2025**

🧠 **Assunto principal: Métodos numéricos de integração definidos e suas aplicações práticas em engenharia**

📚 **Tópicos abordados:**

🔹 1. Motivação e Fundamentos

- Por que integrar numericamente?
- Integração como **área sob curvas** e relação com **solução de EDOs**
- Papel central da integração numérica em contextos experimentais e computacionais

---

🔹 2. Fórmulas Fechadas de Newton-Cotes

- Construção geral via interpolação polinomial
- **Regra do Trapézio**
  - Formulação
  - Interpretação geométrica
  - Erro associado à aproximação
- **Regra de Simpson 1/3 e 3/8**
  - Derivação e aplicação
  - Comparações entre as regras
  - Condições de aplicação (número de subintervalos)

🔹 3. Integrais Múltiplas

- Integração em 2D e 3D com aplicação em engenharia
- Conceito de temperatura média sobre uma superfície

📌 **Estudo de Caso 1:**

- **Transferência de Calor** em placas planas
  - Determinação da temperatura média sobre região bidimensional

---

🔹 4. Estudos de Caso Aplicados

- **Engenharia Naval / Esportiva**
  - **Cálculo da força efetiva no mastro de um veleiro de corrida**
    - Integração sobre distribuição de carga ao longo do mastro
- **Engenharia Elétrica**
  - **Corrente efetiva em circuitos**
    - Integração de i2(t) para cálculo de corrente RMS
- **Engenharia Aeronáutica / Mecânica**
  - **Força de arrasto em corpos aerodinâmicos**
    - Integração de dados de pressão obtidos em túnel de vento
    - Uso do **Teorema do Transporte de Reynolds**
    - Conexão entre conceitos físicos e integração numérica

🧩 **Observações:**

- Este módulo, apesar de breve, é fundamental para conectar a parte de **manipulação de dados experimentais** com conceitos futuros em **equações diferenciais** e análise computacional de escoamentos.
- Ilustra fortemente a transição do **discreto** (dados) para o **contínuo modelado** (funções integradas numericamente).

🔄 Módulo 7 — Equações Diferenciais Ordinárias: Modelagem, Métodos e Aplicações

Duração prevista: 2 encontros (29/11 e 06/12/2025)

📅 **Datas dos encontros:**

- **29/11/2025**
- **06/12/2025**

🧠 **Assunto principal: Resolução numérica de equações diferenciais ordinárias (EDOs) via métodos de passo único**

📚 **Tópicos abordados:**

🔹 1. Introdução às EDOs

- Diferença entre:
  - **Problema de Valor Inicial (PVI)**
  - **Problema de Valor de Contorno (PVC)**
- Classificação das EDOs:
  - Ordem
  - Linearidade
  - Autonomia
  - Rigidez (comentário introdutório)
- Aplicabilidade de métodos numéricos

🔹 2. Abordagem de PVC como PVI: Método do Tiro

- Formulação do método do tiro
- Relação com métodos vistos no **Módulo 2**:
  - Newton-Raphson para funções escalares
  - Analogias gráficas e busca de zeros

🔹 3. Métodos de Passo Único

🧮 **Runge-Kutta e seus fundamentos**

- Evolução dos métodos:
    - **Método de Euler**
        - Derivação
        - Interpretação geométrica
        - Erro de truncamento local via série de Taylor
    - **Método de Heun** (Preditor-Corretor)
        - Equivalência com Runge-Kutta de 2ª ordem
        - Visualização em fases predição/correção
    - **Métodos de Runge-Kutta** (RK2, RK3, RK4)
        - Construção geral
        - Famílias de coeficientes
        - Vantagens e limitações
        - Comparação entre ordens

🔹 4. Métodos de Passo Adaptativo

- Fundamentos da adaptação de passo
- **Runge-Kutta de passo adaptativo:**
    - **Método de Runge-Kutta de Fehlberg**
    - **Versão Cash-Karp**
- Estratégias de controle do erro
- Problematização:
    - Exemplo de uma **bolha oscilando em fluido magnético**
        - Comportamento não linear com regiões de gradiente alto
        - Necessidade de controle do passo

🔹 5. Estudos de Caso

- **Engenharia Química:**
    - **Resposta transiente de reatores de mistura**
        - EDOs com taxas de reação dependentes do tempo

- **Modelagem Ecológica:**
    - **Modelo Predador-Presa (Lotka-Volterra)**
        - Dinâmica de populações
        - Discussão qualitativa das soluções
- **Física e sistemas dinâmicos:**
    - **Equações de Lorenz**
        - Sensibilidade a condições iniciais
        - Introdução ao caos determinístico
        - Representação tridimensional da trajetória
        - Exploração visual e física do comportamento

🔹 6. Conclusão e Conexões Futuras

- Transição para EDPs
- Reflexão sobre o papel das EDOs como **ponte entre modelos físicos e simulações numéricas**

🌊 Módulo 8 — Equações Diferenciais Parciais: Modelagem, Discretização e Simulação

Duração prevista: 3 encontros (13/12 e 20/12/2025)

📅 **Datas dos encontros:**

- **13/12/2025**
- **20/12/2025**

🧠 **Assunto principal: Introdução conceitual e numérica às Equações Diferenciais Parciais (EDPs) com aplicações práticas em volumes finitos**

📚 **Tópicos abordados:**

🔹 1. Introdução às EDPs

- Exemplos ilustrativos de EDPs:
    - Ordem da equação
    - Linearidade
- Classificação por natureza:
    - **Elípticas** (ex: equação de Laplace)
    - **Parabólicas** (ex: equação do calor)
    - **Hiperbólicas** (ex: equação da onda)
- Aplicações físicas:
    - Transferência de calor
    - Microhidrodinâmica
    - Equações de Navier-Stokes (introdução)
    - Distribuição térmica em tecidos tumorais (magneto-hipertermia)
    - Vibrações mecânicas em cordas e estruturas

🔹 2. Método das Diferenças Finitas

- Derivação da **equação de diferenças de Laplace**
- Implementação numérica:
    - **Método de Liebmann** (iterativo)

        - Análise de convergência e custo computacional
- Tratamento de:
    - Condições de contorno (Dirichlet, Neumann, mistas)
    - Fronteiras irregulares
- Exemplos práticos aplicados à **condução de calor bidimensional**

🔹 3. Introdução ao Método dos Volumes Finitos

- Motivação e comparação com diferenças finitas
- **Construção de volumes de controle**:
    - Interpretação física via conservação
    - Aplicação à equação de Laplace
- Equações gerais de balanço:
    - Forma integral
    - Identificação dos termos:
        - Termo de difusão (Laplaciano)
        - Termo de advecção (divergente)
- Aplicação de teoremas integrais:
    - Teorema da divergência
    - Teorema de Gauss

🔹 4. Discretização no contexto dos Volumes Finitos

- **Discretização do termo difusivo (Laplaciano)**:
    - Aproximações centradas
    - Correção não ortogonal
- **Discretização do termo advectivo**:
    - Interpolação linear
    - Esquema **upwind**
    - Controle de difusão numérica
        - Esquemas limitadores (comentário introdutório)
- Discussão sobre:
    - **Solução segregada**

    - Construção do sistema linear resultante
    - Tratamento implícito vs. explícito

🔹 5. Introdução ao OpenFOAM

- Motivação e natureza do software (open-source, C++, filosofia modular)
- Arquivos de configuração:
    - `controlDict`, `fvSchemes`, `fvSolution`, `transportProperties`
    - Ligação entre as configurações e os conceitos teóricos vistos no curso
- Demonstrações práticas:
    - Casos simples de simulação
    - Navegação no ambiente de simulação
    - Interpretação dos resultados
- Encerramento do curso com um **estudo de caso completo** (ex: difusão de calor ou escoamento laminar simples)

🔹 6. Conclusão Geral do Curso

- Revisão integrativa dos principais conceitos vistos
- Reflexão sobre os **pilares do método científico aplicado à simulação computacional**
- Convite à continuidade do aprendizado:
    - OpenFOAM
    - Fortran, C++, Python
    - PINNs
    - Códigos próprios
- Considerações finais e agradecimentos