Métodos Numéricos

Daniela Cristina Lübke

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro - UFRRJ

28 de Novembro, 2013

Roteiro

Motivação

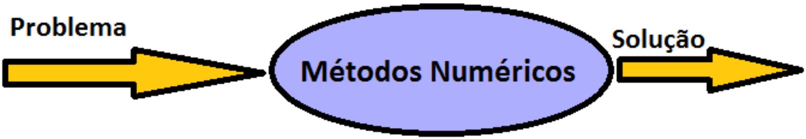
- A maioria dos problemas não possuem solução algébrica. Notadamente os de interesse prático;

Motivação

- A maioria dos problemas não possuem solução algébrica. Notadamente os de interesse prático;
- Problemas reais são resolvidos através de Métodos Numéricos;

Motivação

- A maioria dos problemas não possuem solução algébrica. Notadamente os de interesse prático;
- Problemas reais são resolvidos através de Métodos Numéricos;



Método Numérico

O que é um Método Numérico?

Um Método Numérico é um conjunto de procedimentos numéricos, que se aplicam repetidamente (iterativo) para aproximar a solução de um problema.

Para que servem os Métodos Numéricos?

Para resolver problemas não solúveis pela matemática clássica - algébrica

Exemplo Método Numérico simples e eficiente

Raiz quadrada

Calcular a raíz quadrada de $a = 1312$.

Método Numérico: consiste em escolher (chutar) uma aproximação inicial $a_0 > 0$ e aplicar a fórmula

$$a_n = \frac{1}{2}\left(a_{n-1} + \frac{a}{a_{n-1}}\right) \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{1}$$

repetidamente até atingir uma aproximação satisfatória.

Aplicação do Método Numérico: utilizando como ponto inicial $a_0 = 137$ tem-se cálculos acessíveis até para um aluno do ensino fundamental, os quais seguem:

Exemplo Método Numérico simples e eficiente

Raiz quadrada

$$
\begin{aligned}
a_1 &= \frac{1}{2}\left(a_0 + \frac{a}{a_0}\right) \Longrightarrow a_1 = \frac{1}{2}\left(137 + \frac{1312}{137}\right) \Longrightarrow a_1 \approx 73,28 \\
a_2 &= \frac{1}{2}\left(a_1 + \frac{a}{a_1}\right) \Longrightarrow a_2 = \frac{1}{2}\left(73 + \frac{1312}{73}\right) \Longrightarrow a_2 \approx 45,48 \\
a_3 &= \frac{1}{2}\left(a_2 + \frac{a}{a_2}\right) \Longrightarrow a_3 = \frac{1}{2}\left(45 + \frac{1312}{45}\right) \Longrightarrow a_3 \approx 37,07 \\
a_4 &= \frac{1}{2}\left(a_3 + \frac{a}{a_3}\right) \Longrightarrow a_4 = \frac{1}{2}\left(37 + \frac{1312}{37}\right) \Longrightarrow a_4 \approx 36,2297
\end{aligned}
$$

Os termos $a_1, a_2, a_3, a_4, \ldots$ são aproximações para a raiz de $a = 1312$ e quanto maior o índice melhor é a aproximação.

Exemplo Método Numérico simples e eficiente

Raiz quadrada

Para a_4 temos $a_4^2 - a \approx 1312,59 - 1312 = 0,59$. Daí vê-se que a_4 está próximo da raiz desejada, mas essa ainda é uma aproximação grosseira que pode ser melhorada. Calculemos a_5.

$$a_5 = \frac{1}{2}\left(a_4 + \frac{a}{a_4}\right) \Longrightarrow a_5 = \frac{1}{2}\left(36,2297 + \frac{1312}{36,2297}\right) \Longrightarrow$$

$$a_5 \approx 36,221541$$

E a_5 é uma boa aproximação para $\sqrt{1312}$, pois
$a_5^2 \approx 1312,000324146$.

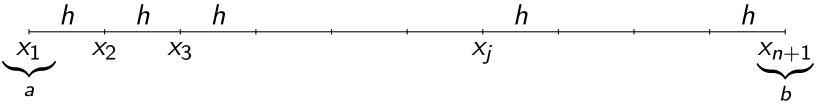
$$\sqrt{1312} \approx 36,221541$$

Melhores aproximações para $\sqrt{a}$ poderiam ser determinadas calculando-se a_6, a_7 e assim sucessivamente.

Ingredientes Básicos - Discretização

Os problemas envolvendo ED's encontram-se em um espaço infinito e o MDF discretiza o domínio do problema criando uma malha.

Está malha é composta de nós. Cada nó é separado por uma distância h



Ingredientes Básicos - Série de Taylor

O MDF aproxima a derivada em cada nó da malha utilizando expressões algébricas que são obtidas ao truncar a Série de Taylor:

$$f(x) = f(a)(x-a)^0 + \frac{f'(a)(x-a)^1}{1!} + \ldots + \frac{f^n(a)(x-a)^n}{n!}$$

$$u(a+h) = u(a) + hu'(a) + \frac{h^2}{2!}u''(a) + \ldots + \frac{h^n}{n!}u^{(n)}(a)$$

Ingredientes Básicos - Aproximação da derivada

$$u(a-h) \approx u(a) - hu'(a) + \frac{h^2 u''(a)}{2!} - \frac{h^3 u'''(a)}{3!} + \frac{h^4 u''''(a)}{4!} \tag{2}$$

$$u(a+h) \approx u(a) + hu'(a) + \frac{h^2 u''(a)}{2!} + \frac{h^3 u'''(a)}{3!} + \frac{h^4 u''''(a)}{4!} \tag{3}$$

$$u''(a) = \frac{u(a-h) - 2u(a) + u(a+h)}{h^2} \tag{4}$$

Exemplo de aplicação - Solução de EDO

$$\begin{cases} -u''(x) + \rho u(x) = f(x), & 0 < x < 1, \quad \rho \geq 0 \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases} \tag{5}$$

em que $f(x)$ é conhecida e y é desconhecida. O objetivo deste problema é encontrar $y(x)$ que satisfaça as condições impostas pelo PVC.

$$u''(a) = \frac{u(a-h) - 2u(a) + u(a+h)}{h^2} \tag{6}$$

Devido a condição de contorno $u(x_1) = u(x_{n+1}) = 0$, basta aplicar essa equação aos pontos interiores a malhas x, ou seja, $x_2, x_3, \ldots, x_n$.

Exemplo de aplicação - Fórmula de recorrência

Considerando a aproximação no $j-$ésimo ponto da malha, a substituição da equação (4) no PVC fornece

$$\underbrace{a-h}_{x_{j-1}} \quad \underbrace{a}_{x_j} \quad \underbrace{a+h}_{x_{j+1}}$$

$$-\frac{u(x_{j-1}) - 2u(x_j) + u(x_{j+1})}{h^2} + \rho \cdot u(x_j) = f(x_j)$$

Substituindo $u(x_{j-1}) = u_{j-1}, u(x_j) = u_j$ e $f(x_j) = f_j$, para facilitar a notação, temos:

$$\frac{-u_{j-1} + 2u_j - u_{j+1}}{h^2} + \frac{h^2 \rho \cdot u_j}{h^2} = f_j$$

Exemplo de aplicação - Fórmula de recorrência

Efetuando as simplificações apropriadas temos

$$\frac{1}{h^2}\left(-u_{j-1} + (2+\rho h^2)u_j - u_{j+1}\right) = f_j, \quad \forall j = 2, \ldots, n$$

Quando j varia de 2 a n são descritas $n-1$ equações lineares:

$$\begin{array}{ccc}
j = 2 & \Longrightarrow & \frac{1}{h^2}\left(-u_1 + (2+\rho h^2)u_2 - u_3\right) = f_2 \\
j = 3 & \Longrightarrow & \frac{1}{h^2}\left(-u_2 + (2+\rho h^2)u_3 - u_4\right) = f_3 \\
\vdots & \vdots & \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \\
j = n-1 & \Longrightarrow & \frac{1}{h^2}\left(-u_{n-2} + (2+\rho h^2)u_{n-1} - u_n\right) = f_{n-1} \\
j = n & \Longrightarrow & \frac{1}{h^2}\left(-u_{n-1} + (2+\rho h^2)u_n - u_{n+1}\right) = f_n
\end{array}$$

Exemplo de aplicação - O sistema resultante

$$
\begin{cases}
\frac{(2+\rho h^2)u_2}{h^2} & -\frac{u_3}{h^2} & +0u_4 & +0u_5 & +\dots & & \dots & +0u_n & = f_2 \\
-\frac{u_2}{h^2} & +\frac{(2+\rho h^2)u_3}{h^2} & -\frac{u_4}{h^2} & +0u_5 & +\dots & & \dots & +0u_n & = f_3 \\
0u_2 & -\frac{u_3}{h^2} & +\frac{(2+\rho h^2)u_4}{h^2} & -\frac{u_5}{h^2} & +\dots & & \dots & +0u_n & = f_4 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\
0u_2 & +0u_3 & +0u_4 & \dots & -\frac{u_{n-2}}{h^2} & & +\frac{(2+\rho h^2)u_{n-1}}{h^2} & -\frac{u_n}{h^2} & = f_{n-1} \\
0u_2 & +0u_3 & +0u_4 & \dots & \dots & & -\frac{u_{n-1}}{h^2} & +\frac{(2+\rho h^2)u_n}{h^2} & = f_n
\end{cases}
$$

Exemplo de aplicação - O sistema resultante

$$u^t = (u_2, u_3, \ldots, u_n) \quad f^t = (f_2, f_3, \ldots, f_n)$$

Com esta notação e colocando o termo $\frac{1}{h^2}$ em evidência o sistema pode ser escrito na forma matricial, como segue

$$\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 2+\rho h^2 & -1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ -1 & 2+\rho h^2 & -1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & -1 & 2+\rho h^2 & -1 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & -1 & 2+\rho h^2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & -1 & 2+\rho h^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

Assim podemos escrever o sistema na forma

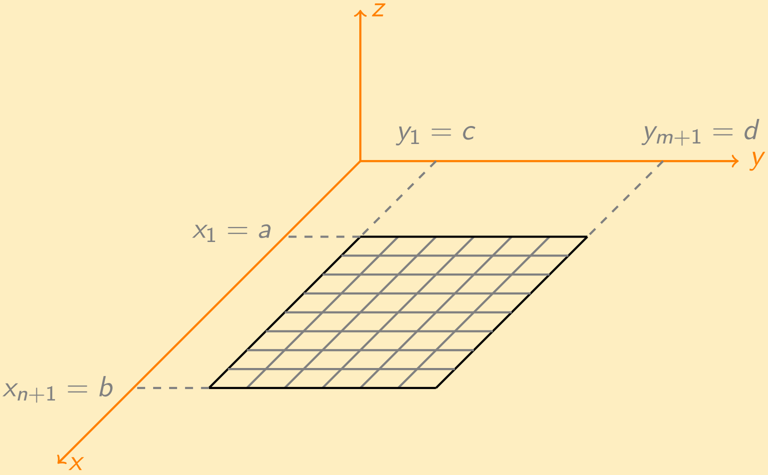
$$\frac{1}{h^2}Au = f \Longrightarrow Au = f$$

Exemplo de aplicação

Considere a seguinte formulação, bidimensional, do Problema do Valor de Contorno - PVC

$$\begin{cases} -u_{xx} - u_{yy} = f(x,y), \\ (x,y) \in \Omega = \{x, y \in \mathbb{R} \mid a < x < b, c < y < d\}. \\ u(x,y) = 0, \forall x, y \in \partial(\Omega) \end{cases} \tag{7}$$

Exemplo de aplicação - Discretização do domínio



Exemplo de aplicação - O Sistema Linear

$$Au = f$$

Em que

$$A = \begin{pmatrix} B & \gamma I & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \gamma I & B & \gamma I & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \gamma I & B & \gamma I & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \gamma I & B & \gamma I \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \gamma I & B \end{pmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \beta & \alpha & \beta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \beta & \alpha & \beta \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \beta & \alpha \end{bmatrix}.$$

$$\alpha = \left(\frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2} \right), \quad \beta = -\frac{1}{h_y^2}, \quad \gamma = -\frac{1}{h_x^2}$$

$$\begin{aligned} u^T &= (u_2, u_3, \dots, u_n) \quad \text{onde} \quad u_i = (u_{i,2}, u_{i,3}, \dots, u_{i,m}) \\ f^T &= (f_2, f_3, \dots, f_n) \quad \text{onde} \quad f_i = (f_{i,2}, f_{i,3}, \dots, f_{i,m}) \end{aligned}$$

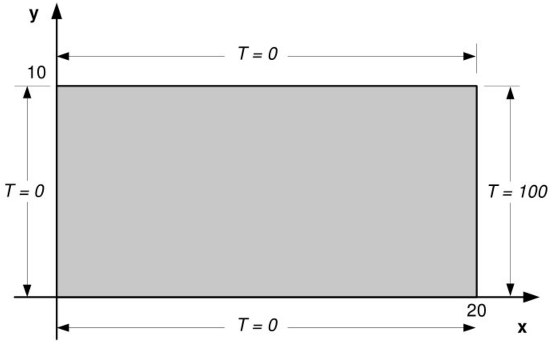
Na matriz A, I é a matriz identidade e cada zero representa a matriz nula, ambas de ordem $n-1$. Em B o zero é número.

Exemplo EDP

Considere o problema de transferência de calor por condução em regime permanente.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0, \\ T(x,0) = 0, \quad T(x,10) = 0, \quad T(0,y) = 0, \;\; T(20,y) = 100. \end{cases} \tag{8}$$

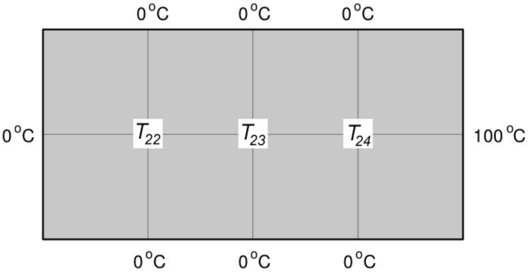
Exemplo EDP



Placa retangular com temperaturas definidas na fronteira do problema.

Exemplo EDP

Utilizando $h = 5$ temos: $h = \dfrac{b-a}{n-1} \implies 5 = \dfrac{20-0}{n-1} \implies n = 5$



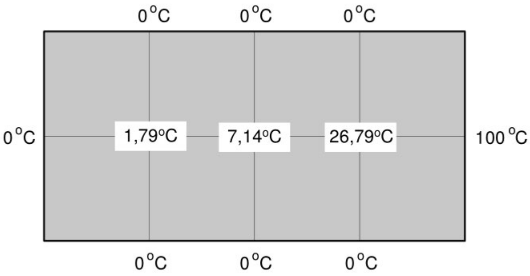
Discretização do domínio com $h = 5$.

Exemplo EDP

O problema é representado da seguinte forma:

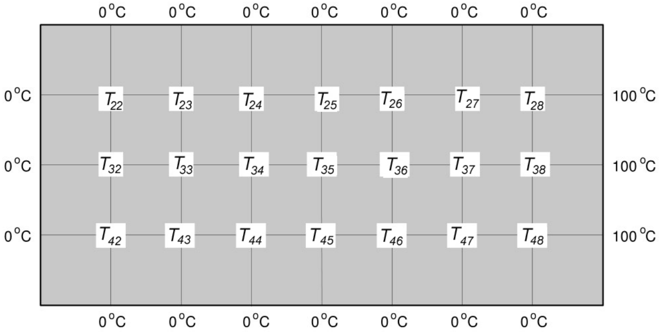
$$\begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & -4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} T_{22} \\ T_{23} \\ T_{24} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -100 \end{bmatrix} \tag{9}$$

A solução deste sistema fornece os valores: $T_{22} = 1,79^oC$, $T_{23} = 7,14^oC$ e $T_{24} = 26,79^oC$.



Exemplo EDP

Fazendo-se $n = 7$ colunas e $m = 3$ linhas, temos:



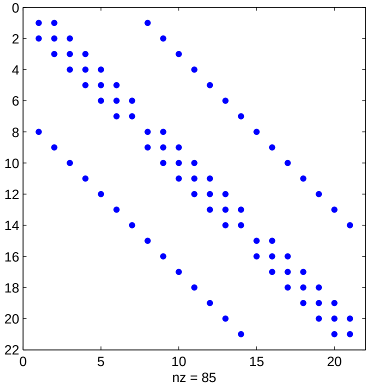
Discretização do domínio do problema de transferência de calor em uma placa retangular.

$$A = \begin{bmatrix}
-4 & 1 & & & & & & 1 & & & & & & & & & & & & & \\
1 & -4 & 1 & & & & & & 1 & & & & & & & & & & & & \\
 & 1 & -4 & 1 & & & & & & 1 & & & & & & & & & & & \\
 & & 1 & -4 & 1 & & & & & & 1 & & & & & & & & & & \\
 & & & 1 & -4 & 1 & & & & & & 1 & & & & & & & & & \\
 & & & & 1 & -4 & 1 & & & & & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & & & 1 & -4 & & & & & & & 1 & & & & & & & \\
1 & & & & & & & -4 & 1 & & & & & & 1 & & & & & & \\
 & 1 & & & & & & 1 & -4 & 1 & & & & & & 1 & & & & & \\
 & & 1 & & & & & & 1 & -4 & 1 & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & 1 & & & & & & 1 & -4 & 1 & & & & & & 1 & & & \\
 & & & & 1 & & & & & & 1 & -4 & 1 & & & & & & 1 & & \\
 & & & & & 1 & & & & & & 1 & -4 & 1 & & & & & & 1 & \\
 & & & & & & 1 & & & & & & 1 & -4 & & & & & & & 1 \\
 & & & & & & & 1 & & & & & & & -4 & 1 & & & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & & & & & 1 & -4 & 1 & & & & \\
 & & & & & & & & & 1 & & & & & & 1 & -4 & 1 & & & \\
 & & & & & & & & & & 1 & & & & & & 1 & -4 & 1 & & \\
 & & & & & & & & & & & 1 & & & & & & 1 & -4 & 1 & \\
 & & & & & & & & & & & & 1 & & & & & & 1 & -4 & 1 \\
 & & & & & & & & & & & & & 1 & & & & & & 1 & -4
\end{bmatrix}$$

$$T = (T_{22}, T_{23}, T_{24}, T_{25}, T_{26}, T_{27}, T_{28}, T_{32}, T_{33}, T_{34}, T_{35}, T_{36}, T_{37}, T_{38}, T_{42}, T_{43}, T_{44}, T_{45}, T_{46}, T_{47}, T_{48})^T$$

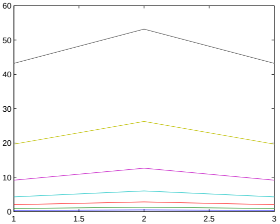
$$B = (0, 0, 0, 0, 0, 0, -100, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -100, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -100)^T$$

Exemplo EDP

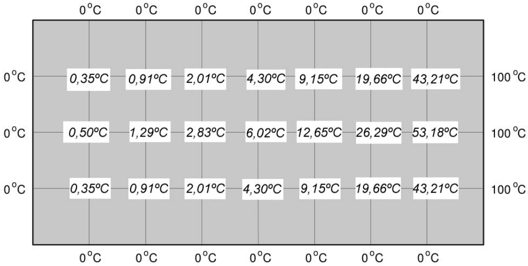


Estrutura da matriz A os coeficientes não nulos são os pontos.

Exemplo EDP



Variação de temperatura na placa.



Solução do problema com 3 linhas e 7 colunas.

A importância dos Sistemas Lineares

A importância dos Sistemas Lineares

- Tanto para EDO's quanto para EDP's os Sistemas Lineares mostram-se importantes pois são o posso em que se calcula as aproximações, é o que faz a conta.

A importância dos Sistemas Lineares

- Tanto para EDO's quanto para EDP's os Sistemas Lineares mostram-se importantes pois são o posso em que se calcula as aproximações, é o que faz a conta.
- Outros Métodos Numéricos (elementos finitos, volumes finitos, Newton inexato) também exigem a resolução de Sistemas Lineares como um passos intermediário ou como mecanismo para o cálculo da aproximação como os aqui expostos.

A importância dos Sistemas Lineares

- Tanto para EDO's quanto para EDP's os Sistemas Lineares mostram-se importantes pois são o posso em que se calcula as aproximações, é o que faz a conta.
- Outros Métodos Numéricos (elementos finitos, volumes finitos, Newton inexato) também exigem a resolução de Sistemas Lineares como um passos intermediário ou como mecanismo para o cálculo da aproximação como os aqui expostos.
- Há uma gama considerável de situações que são modeladas por equações ou inequações lineares. Algumas delas são tão importantes que são objeto particular de estudos. Exemplo disso é a Programação Linear, disciplina obrigatória na maioria dos currículos de matemática.

Método de Jacob

Carl Gustav Jacob Jacobi (1804 - 1851) foi um matemático alemão, é considerado um dos maiores matemáticos de sua geração. O Método de Jacobi foi apresentado em 1845.

Sistemas Lineares

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad . \qquad\quad . \qquad\qquad\quad . \qquad\quad . \\ \quad . \qquad\quad . \qquad\qquad\quad . \qquad\quad . \\ \quad . \qquad\quad . \qquad\qquad\quad . \qquad\quad . \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Método de Jacob

Método de Jacob:

$$x_1^{(1)} = \frac{\left(b_1 - \sum_{j=2}^{n} a_{1j} x_j^{(0)}\right)}{a_{11}}$$

Repete-se o mesmo processo para $x_2^{(1)}, ..., x_n^{(1)}$:

$$x_i^{(k)} = \frac{\left(b_i - \sum_{j=1, j\neq i}^{n} a_{ij} x_j^{(k-1)}\right)}{a_{ii}} , \quad i = 1, 2, ..., n.$$

Seidel

Phillip Ludwing von Seidel (1821-1896) foi aluno e assistente de Jacobi, solucionou problemas de equações lineares que resultavam do trabalho de Gauss sobre mínimos quadrados.

O procedimento numérico de Gaus-Seidel pode ser visto como uma modificação do método de Jacobi. Nele atualiza-se a nova componente a partir da componente anterior.

Método de Gaus-Seidel

Método de Gaus-Seidel:

$$x_i^{(k)} = \frac{\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k-1)}\right)}{a_{ii}}, \quad i = 1, 2, ..., n$$

Exemplo: Utilizando o Método de Gaus-Seidel resolva o seguinte Sistema Linear:

$$
\begin{aligned}
10x_1 + 2x_2 - 3x_3 + 2x_4 &= 32 \\
2x_1 - 15x_2 + 3x_3 - 2x_4 &= -59 \\
1x_1 - 3x_2 + 20x_3 + 2x_4 &= -38 \\
2x_1 + 2x_2 - 1x_3 + 30x_4 &= 160
\end{aligned}
$$

Efetuando os cálculos encontramos:

$x^{(1)} = (3,2 \quad ; \quad 4,36 \quad ; \quad -1,41 \quad ; \quad 4,78).$

$x^{(2)} = (0,95 \quad ; \quad 3,14 \quad ; \quad -1,95 \quad ; \quad 5,00).$

$x^{(3)} = (0,99 \quad ; \quad 3,01 \quad ; \quad -2,00 \quad ; \quad 5,00).$

$x^{(4)} = (1,00 \quad ; \quad 3,00 \quad ; \quad -2,00 \quad ; \quad 5,00).$

$x^{(5)} = (1,00 \quad ; \quad 3,00 \quad ; \quad -2,00 \quad ; \quad 5,00).$

Outros métodos para resolver Sistemas Lineares

- Fatoração LU;
- Decomposição de Cholesky;
- Decomposição QR;
- Decomposição SVD;
- Métodos Gradientes Conjugados;
- Método Multi-Grid.

Considerações finais

Considerações

- Os Métodos Numéricos em geral são ferramentas simples e podem ser aplicados convenientemente nos diversos níveis de ensino, com baixa complexidade e resultados formidáveis a baixo custo.
- Cada método resolve melhor um determinado tipo de problema, não há um método robusto que adeque-se bem a todos os problemas.
- Métodos Numéricos também podem ser sofisticados e complicados.

Enfim, está quase acabando, só faltam as suas perguntas

Obrigada