# SME0305 - 2020


## Gustavo C. Buscaglia

ICMC - Sala 4-219, Ramal 738176, gustavo.buscaglia@gmail.com


http://www.lcad.icmc.usp.br/~buscaglia/teaching/sme0305_materiais2020/index.html

---

## Métodos Numéricos e Computacionais I - Engenharia de Materiais e Manufatura

**Ementa (Júpiter):** Desenvolvimento de algoritmos, estruturas condicionais e de repetição, noções básicas de algoritmos, algoritmos básicos: Iteração, soma de vetores, produto de matrizes. Manipulação de vetores e matrizes. Estruturação de um programa em sub-rotinas. Funções. Manipulação de arquivos. Geração de gráficos. Estudo de uma linguagem equivalente ao MATLAB (SCILAB ou OCTAVE). Estudo do erro de arredondamento. Solução de sistemas lineares. Métodos diretos: Métodos de eliminação de Gauss, fatoração LU, Gauss com pivotamento, Cholesky, fatoração QR. Métodos iterativos: métodos de Gauss-Seidel, Jacobi e SOR. Método dos gradientes conjugados. Autovalores e Autovetores: Método das potências, Métodos para cálculo de autovalores de matrizes simétricas. Aplicação da linguagem de programação (SCILAB ou OCTAVE) na solução de problemas de cálculo numérico.

---

## Considerações iniciais:

- O cálculo numérico, tradicionalmente, é o estudo de **algoritmos** que usam **aproximações numéricas** para resolver **problemas matemáticos**.

- **Algoritmo:** Sequência bem definida e finita de operações, implementáveis num computador.
- **Aproximações numéricas:** A exatidão requer tempo infinito, memória infinita, e no final das contas *os dados não são exatos*.
- **Problemas matemáticos:** Muitas vezes significando *equações de um modelo matemático* do sistema ou processo.

- Os **problemas matemáticos** clássicos são:
  - Determinar $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ax = b$.
  - Determinar $\lambda \in \mathbb{C}$ e $x \in \mathbb{R}^n$ tais que $Ax = \lambda x$.
  - Determinar $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $f(x) = 0$.
  - Determinar $x \in \mathbb{R}^n$ que minimiza $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.
  - Dados $\{x_i, y_i\}$, determinar uma função $f$ tal que $y_i = f(x_i)$ ou que minimize $\|y_i - f(x_i)\|$ (ajuste).
  - Calcular $\int_D f(x)\, dx$ e/ou $df/dx$ e/ou $d^2 f/dx^2$, etc.
  - Determinar $x(t)$ tal que $x'(t) = f(x, t)$ e $x(0) = x_0$.

- Os **problemas matemáticos** clássicos são:
  - Determinar $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ax = b$. Algebra linear
  - Determinar $\lambda \in \mathbb{C}$ e $x \in \mathbb{R}^n$ tais que $Ax = \lambda x$. Algebra linear
  - Determinar $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $f(x) = 0$. Cálculo
  - Determinar $x \in \mathbb{R}^n$ que minimiza $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Cálculo
  - Dados $\{x_i, y_i\}$, determinar uma função $f$ tal que $y_i = f(x_i)$ ou que minimize $\|y_i - f(x_i)\|$ (ajuste). Cálculo
  - Calcular $\int_D f(x)\, dx$ e/ou $df/dx$ e/ou $d^2f/dx^2$, etc. Cálculo
  - Determinar $x(t)$ tal que $x'(t) = f(x, t)$ e $x(0) = x_0$. EDOs

- São problemas que já conhecemos.
- Porém, apenas sabemos resolvê-los em casos muito particulares (matrizes pequenas, funções polinomiais, exponenciais ou trigonométricas, ...).
- Para resolver problemas realistas é necessário o computador.

- Para o computador resolver os problemas matemáticos são transformados,
  - A reta real $\mathbb{R}$ é substituída por um conjunto discreto e finito de pontos.
  - O símbolo $=$ é substituído por $\simeq$, em algum sentido conveniente.
  - Os limites $n \to +\infty$ e $\epsilon \to 0$ nas definições de integral, derivada, etc., são substituídos por versões computáveis.
- Tudo isto deve ser feito com cuidado, já que o erro da resposta pode ser grande mesmo se cada transformação feita ao problema foi "pequena e razoável".

- Existem muitos exemplos bonitos desses “grandes erros provenientes de pequenos erros”, vejamos um deles:

**Problema:** Determinar $f(x,t)$ tal que

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \qquad f(x,0) = \sin 2\pi x.$$

**Problema transformado:** Determinar $f_i^n \simeq f(i\Delta x, n\Delta t)$ tais que

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + \frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0, \qquad f_i^0 = \sin 2\pi x_i.$$

que se computa fazendo $f_i^{n+1} = f_i^n + (\Delta t/2\Delta x)\,(f_{i+1}^n - f_{i-1}^n)$ (código transport1.m).

Escolhemos $\Delta x = 1/N_x$, $\Delta t = \Delta x/2$. Calculamos até $t = 1$. A solução exata é igual à condição inicial. Rodando o código, observar que o erro diminui até $N_x \simeq 150$ e depois começa a crescer. Para $N_x \geq 170$ a solução é absurda.

Porém, o “erro da transformação” é $\leq 1/N_x + 1/N_x^2$, sempre diminui quando $N_x$ cresce!

- Os **bons algoritmos** são bastante sofisticados.
- Felizmente, existem **implementações** em bibliotecas ou softwares tais como Matlab, Octave, Python, R, Excel, etc.
- Em **Octave/Matlab**, por exemplo:
  - Determinar $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ax = b$. $\longrightarrow$ `x=A\b`
  - Determinar $\lambda \in \mathbb{C}$ e $x \in \mathbb{R}^n$ tais que $Ax = \lambda x$. $\longrightarrow$ `[x, lambda]=eig(A)`
  - Determinar $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $f(x) = 0$. $\longrightarrow$ `x=fsolve(f)`
  - Determinar $x \in \mathbb{R}^n$ que minimiza $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. $\longrightarrow$ `x=sqp(f)`
  - Dados $\{x_i, y_i\}$, determinar uma função $f$ tal que $y_i = f(x_i)$ ou que minimize $\|y_i - f(x_i)\|$ (ajuste). $\longrightarrow$ `f=polyfit(x,y)`
  - Calcular $\int_D f(x)\,dx$ e/ou $df/dx$ e/ou $d^2f/dx^2$, etc. $\longrightarrow$ `I=quad(f)`
  - Determinar $x(t)$ tal que $x'(t) = f(x,t)$ e $x(0) = x_0$. $\longrightarrow$ `x=lsode(f)`
  - Infelizmente,
    - A utilização das bibliotecas requer especificar alguns parâmetros.
    - A implementação funciona **quase sempre**, tem limitações.

- Surgem várias perguntas para o **ensino do cálculo numérico** a profissionais dos diversos cursos:
  - Quanto é necessário saber da teoria?
  - Quanto é necessário saber das implementações (ex. Matlab/Octave)?
  - Visto que as implementações tornan possível resolver problemas que de outra maneira seriam impossíveis, como desenvolver essas novas possibilidades?
  - Visto que os problemas resolvidos em Cálculo, GA, EDO, Álgebra Linear, etc., estavam limitados pela necessidade de fazer contas "na mão", quais deveriam ser revisitados com as novas ferramentas (numéricas)?
  - Em outras palavras: Com o cálculo numérico é possível, finalmente, fechar a brecha enorme entre teoria e realidade que existe nas disciplinas básicas. Deveriam ser desenvolvidos exemplos de como fazê-lo?

- Uma proposta de A. Quarteroni e F. Saleri (Polit. Milano) é
  Cálculo Científico com MATLAB e Octave, Springer, 2007
  Esse será nosso livro de texto da disciplina.

- Nosso programa estimado é, para 17 semanas:
  - Introdução a Octave, com vários exemplos (2 semanas). Cap. 1
  - Noções básicas de ponto flutuante (2 semanas). Cap. 1
  - Solução direta de sistemas lineares (2 semanas). Cap. 5
  - Aplicação: Redes hidráulicas e elétricas (1 semana).
  - Aplicação: Condução de calor (1 semana).
  - Métodos iterativos (2 semanas). Cap. 5
  - Problemas de autovalores (2 semanas). Cap. 6
  - Aplicação: Oscilação de estruturas elásticas (2 semanas).
  - Sistemas lineares sobredeterminados. Fatoração QR, SVD e pseudoinversa (2 semanas).
  - Aplicação: Um problema de ajuste de dados experimentais na indústria metalúrgica (1 semana).

**Programa estimado**:

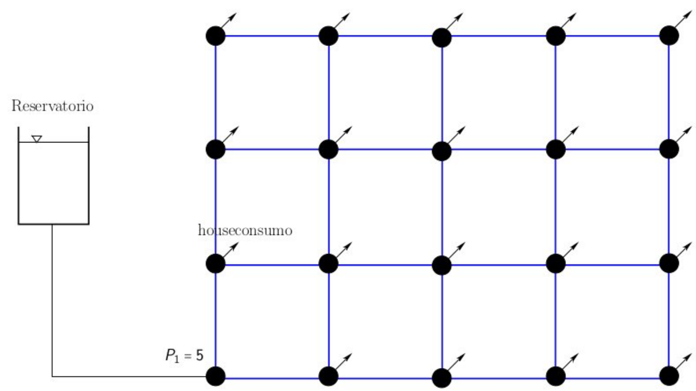
1. Introdução e Octave. 17/02, 19/02, 02/03, **04/03**
2. Ponto flutuante. 09/03, 11/03, 16/03, **18/03**
3. Sistemas lineares, métodos diretos. 23/03, 25/03, 30/03, **01/04**
4. Aplicações. 13/04, 15/04, **22/04**
5. Métodos iterativos. 27/04, 29/04, 04/05, **06/05**
6. Problemas de autovalores. 11/05, 13/05, 18/05, **20/05**
7. Aplicação (vibrações). 25/05, 27/05, 01/06, **03/06**
8. Sistemas sobredeterminados. 08/06, 10/06, 15/06, **17/06**
9. Aplicação e prova substitutiva. 22/06, **24/06**, 29/06, **01/07**

---

**Os problemas matemáticos e a realidade**:

Problema matemático: "Determinar $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ax = b$."

Problema real: "Um bairro tem a rede hidráulica da figura. Ela é alimentada desde um reservatório a pressão 5 atm e cada unidade consome uma vazão de 0.1 m$^3$/h. Anualmente, cada tubulação tem probabilidade 10% de ficar obstruida. Qual é a probabilidade de que alguma das unidades receba uma pressão menor que o mínimo permitido de 1.5 atm?"



Problema matemático: “Determinar $\lambda \in \mathbb{C}$ e $x \in \mathbb{R}^n$ tais que $Ax = \lambda x$.”

Problema “real”: “Um pescador vende peixe fresco grelhado numa barraca na praia. Ele recebe o pedido, pesca, prepara o peixe, grelha, serve e vende. Ele nunca armazena mais de um peixe. Cada hora ele checa se apareceu um novo pedido, o que acontece com probabilidade $p$, e decide o que fazer na próxima hora. Se ele tem um cliente e um peixe, a próxima hora é dedicada a cozinhar o peixe, servir e receber o preço $S$. Se ele tem cliente mas não tem peixe, ele vai pescar, com probabilidade $q$ de conseguir um peixe. Se ele tem peixe e não tem cliente, ele descansa. Se ele não tem cliente nem peixe, ele vai pescar. O custo de manutenção da barraca é de 1 real por hora. A quanto deve vender o peixe?”

Problema matemático: “Dados $\{x_i, y_i\}$ ajustar $f$ tal que $f(x_i) \simeq y_i$.”

Problema real: “Um vetor $X$ de variáveis (meteorológicas, econômicas, etc.) é medido com intervalos de 1 hora. A cada tempo $t$ se dispõe dos valores medidos $X_t$, $X_{t-1}$, $X_{t-2}$, etc. Prever o valor da primeira componente de $X_{t+1}$.”

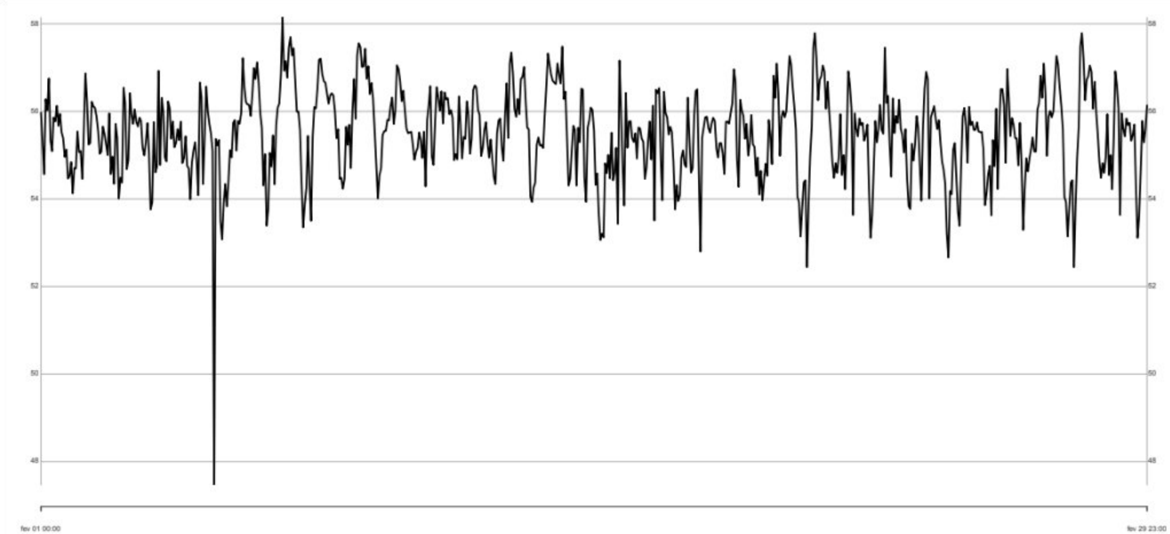


**FIGURE 24:** SPEED TIME SERIES FOR FEBRUARY, 2016.

Dados de trânsito em Sorocaba, projeto CeMEAI-SPLICE

- Existe um processo de transformação do problema real num problema matemático.
- Esse processo é chamado de **modelagem**.
- Sem a capacidade de visualizar matematicamente um problema real, saber resolver problemas matemáticos é de pouca utilidade prática.
- Trabalharemos o assunto da modelagem através de **exemplos de aplicação e miniprojetos**.

**Mecanismos de avaliação**:

- **6 a 8** Provas escritas **objetivas**.
- **1 a 3** Miniprojetos, **avaliados com relatório e apresentação oral**.
- Uma prova **substitutiva** na última semana.
- A média de provas se calcula tirando a média das provas do semestre com a nota da sub (se a média do semestre for maior que a nota da sub, fica a média do semestre). Para passar, a média de provas obtida dessa maneira deve superar 4.9.
- **Bonus sub:** Aqueles alunos cuja média do semestre seja superior a 4.9 são incentivados a fazer a prova sub com um bonus de 1 ponto na média final, apenas sob a condição de tirar 5 ou mais na sub.
- **Bonus supervivência:** Os alunos cuja média de provas seja superior a 4.9 obterão um bonus por terem sobrevivido e não precisarem ser ”recuperados”. Para esse bonus não é condição tirar 5 ou mais na sub (nem sequer precisa fazé-la). O valor do bonus será de 1 ponto.

**Requerimento de tempo:** Essa disciplina deverá requerir apenas o tempo das aulas e **duas horas adicionais** por semana, em média. Se ao longo do semestre acharem que está levando mais do que isto, **avisar ao professor**.