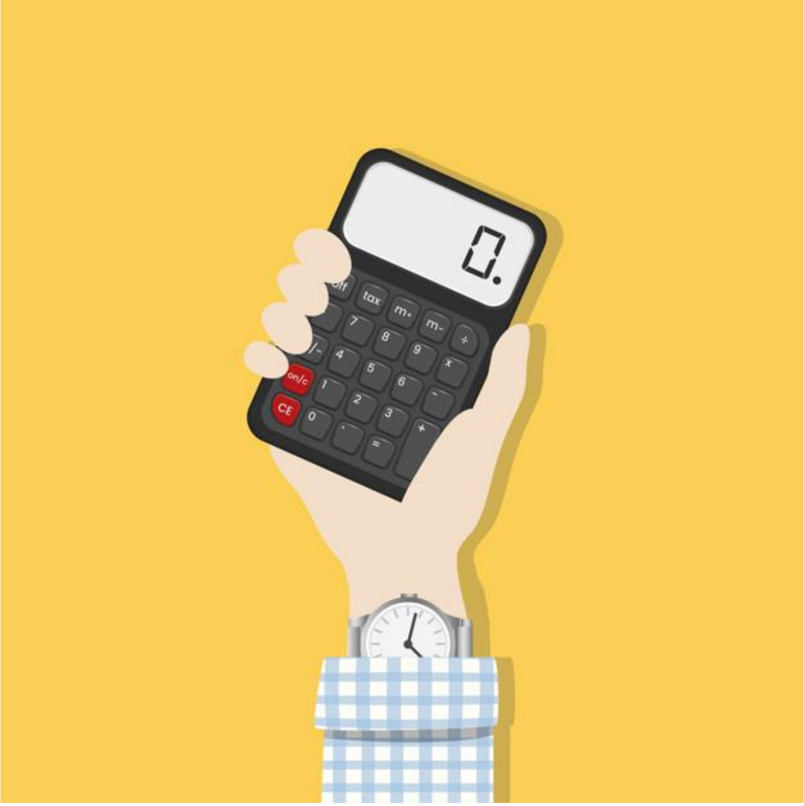
TMEC001 - CÁLCULO NUMÉRICO

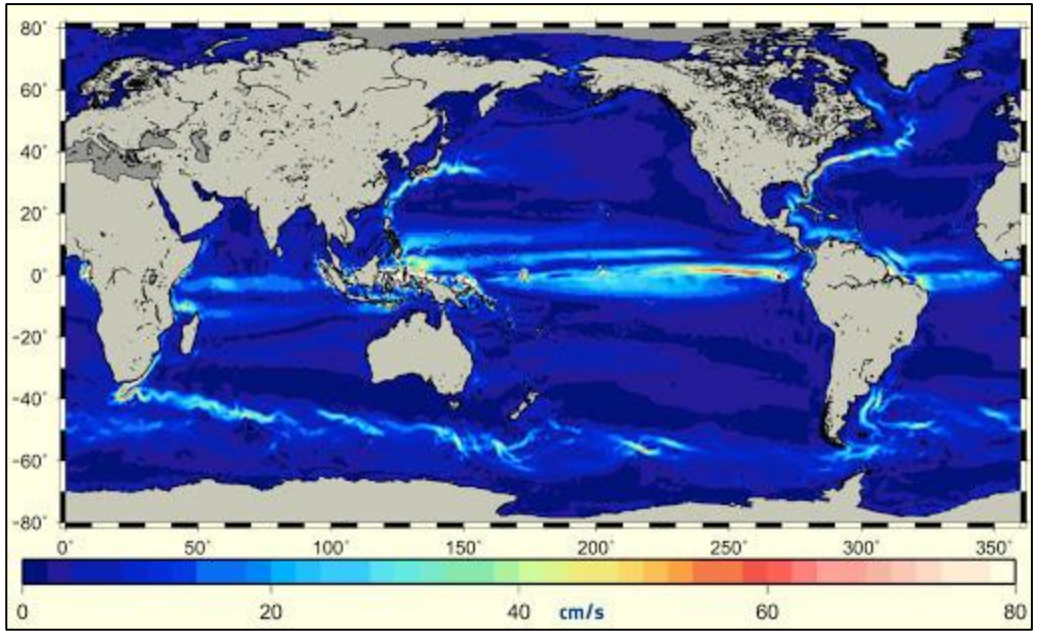
CAPÍTULO 01 – MODELAGEM COMPUTACIONAL E MATEMÁTICA E ANÁLISE DE ERROS

Prof. Felipe R. Loyola
Disciplina: Cálculo Numérico
1º Semestre de 2020

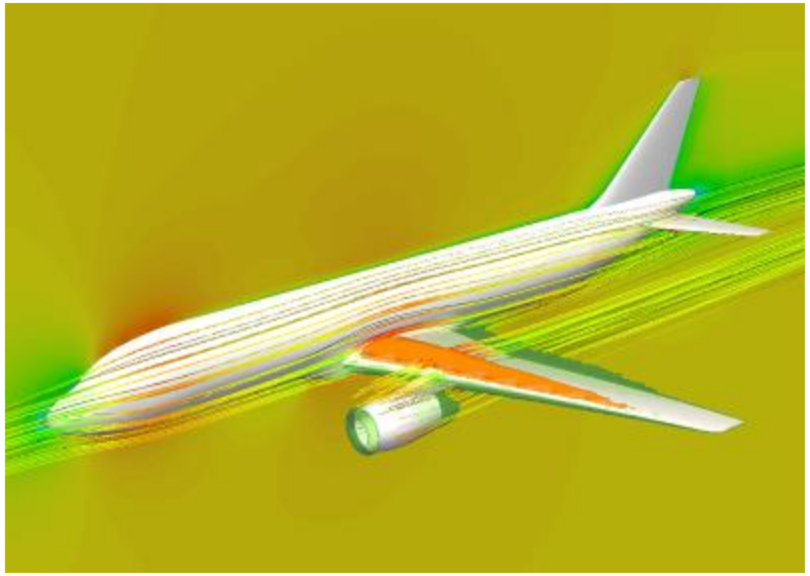
Por que estudar Cálculo Numérico?



Exemplos de aplicações

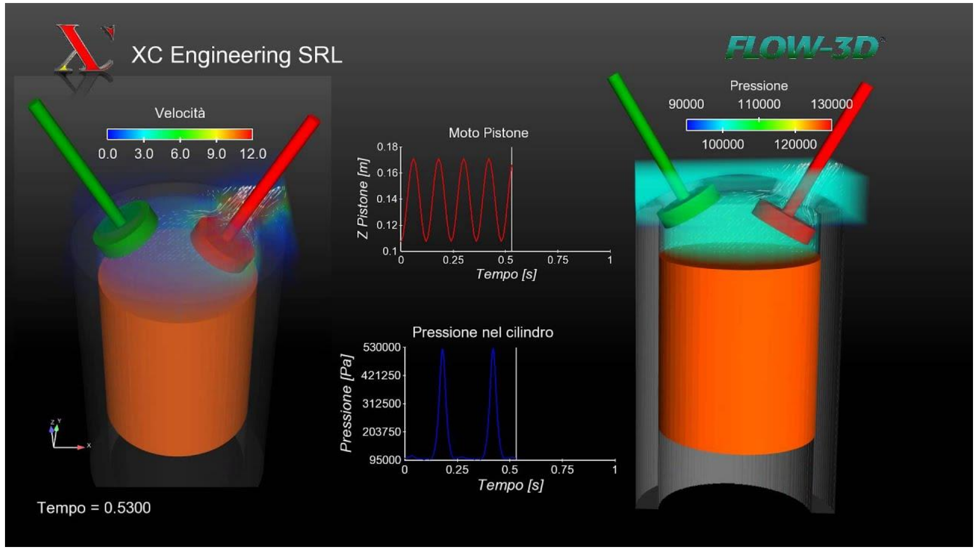


Estimativa de correntes oceânicas

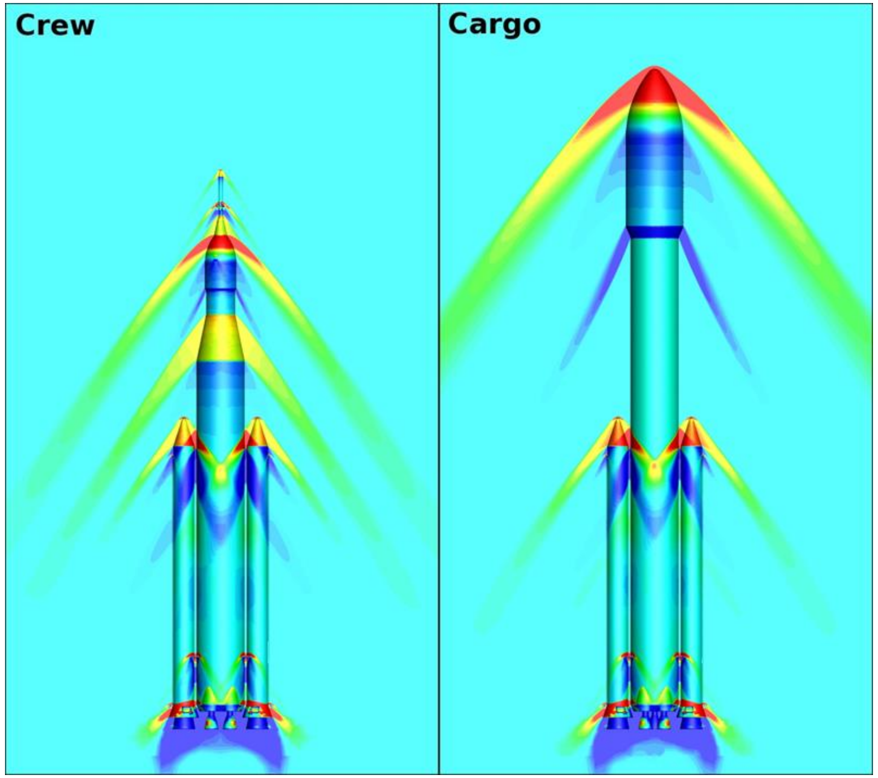


Modelagem de correntes de ar sobre uma aeronave

Exemplos de aplicações

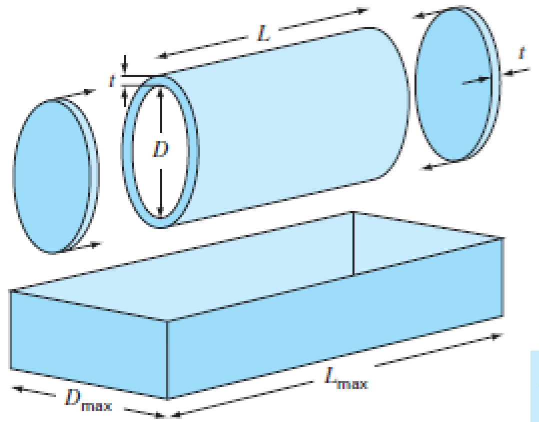


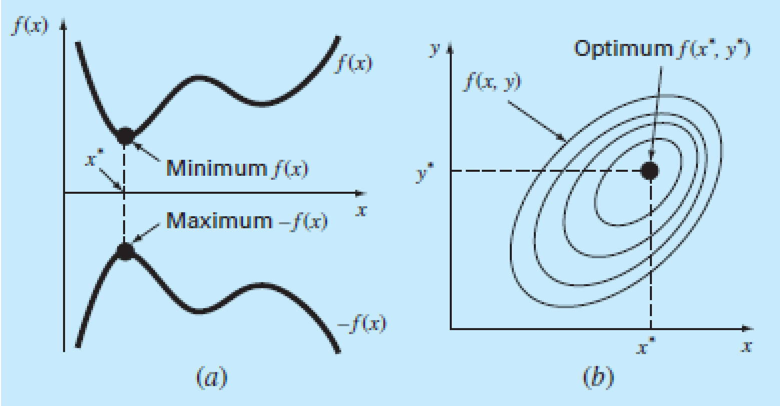
Análise de uma câmara de combustão



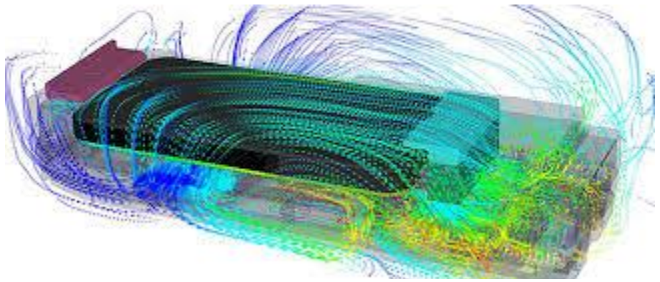
Simulação de foguetes

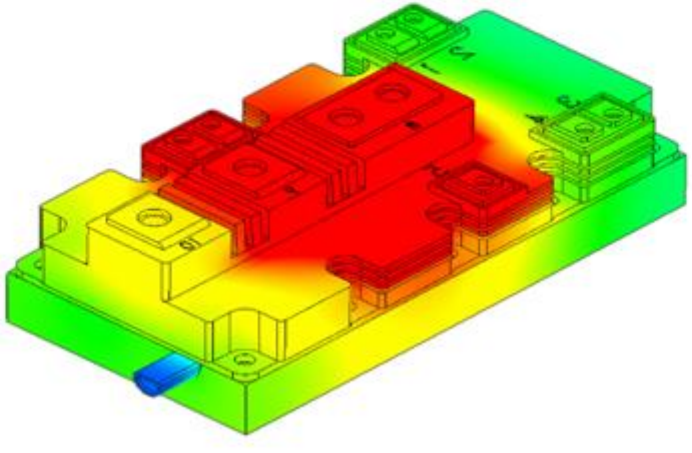
Exemplos de aplicações





Otimização numérica





Análise térmica

1.1.1 – Revisão de Cálculo

- Definição 1.1: Uma função *f* definida em um conjunto *X* de números reais tem o limite *L* em x_0 escrito como

$$\lim_{x \to x_0} f(x) = L \qquad (01)$$

se, dado qualquer número real $\varepsilon > 0$, existe um número real $\delta > 0$ tal que:

$|f(x) - L| < \varepsilon$, sempre que $x \in X$ e $0 < |x - x_0| < \delta$.

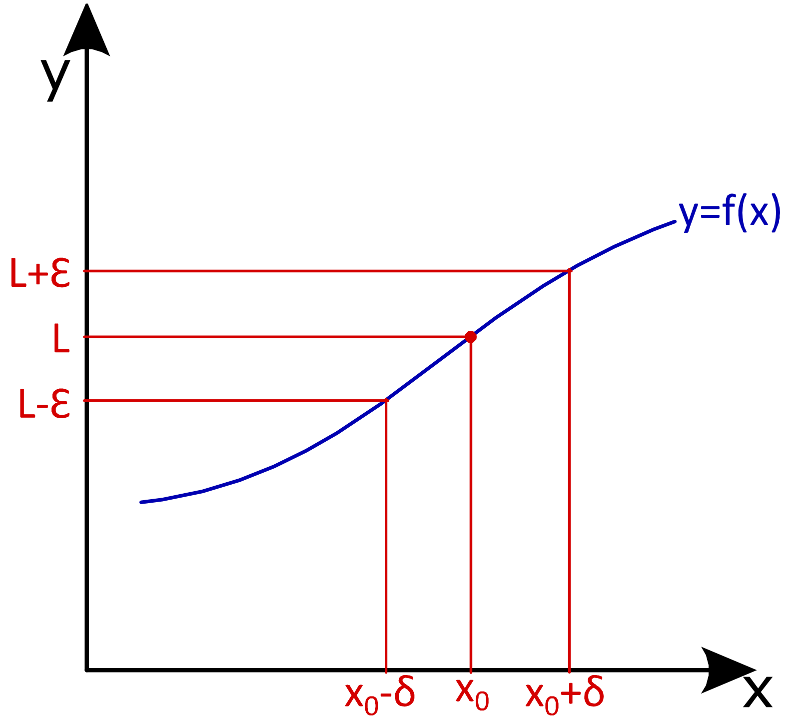


Figura 1.1

1.1.1 – Revisão de Cálculo

- Definição 1.2: Seja *f* uma função definida em um conjunto x de números reais e $x_0 \in X$. Então *f* é continua em x_0 se

$$\lim_{x \to x_0} f(x) = f(x_0) \qquad (02)$$

A função *f* é contínua no conjunto *X* se for contínua em cada número de *X*.

C(X) denota o conjunto de todas as funções que são contínuas em *X*. Quando *X* é um intervalo real, os parênteses nessa notação são omitidos. Por exemplo, o conjunto de todas as funções contínuas no intervalo fechado *[a,b]* é denotado por *C[a,b]*.

- Definição 1.3: Seja $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ uma sequência infinita de números reais ou complexos. A sequência $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ tem o limite x (converge para x) se, para qualquer $\varepsilon > 0$, existe um número inteiro $\mathrm{N}(\varepsilon)$, tal que $|x_n - x| < \varepsilon$, sempre que $n > N(\varepsilon)$. A notação

$$\lim_{n\to\infty} x_n = x \text{ ou } x_n \to x \text{ quando } n \to \infty \quad (03)$$

Significa que a sequência $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ converge para x.

<u>Teorema 1.4</u>: Se f é uma função definida no conjunto X de números reais e $x_0 \in X$, então as seguintes afirmações são equivalentes:

a) f é contínua em x_0

b) Se $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ for qualquer sequência em X convergindo para x_0, então o

$$\lim_{n\to\infty} f(x_n) = f(x_0)$$

1.1.1 – Revisão de Cálculo

- Definição 1.5: Seja f uma função definida em um intervalo aberto contendo x_0. A função f é diferenciável em x_0 se:

$$f'(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \qquad (04)$$

existe. O número $f'(x_0)$ é chamado de derivada de f em x_0. Uma função que tem uma derivada em cada número do conjunto X é diferenciável em X.

A derivada de f em x_0 é a inclinação (ou coeficiente angular) da reta tangente ao gráfico de f em $(x_0,f(x_0))$.

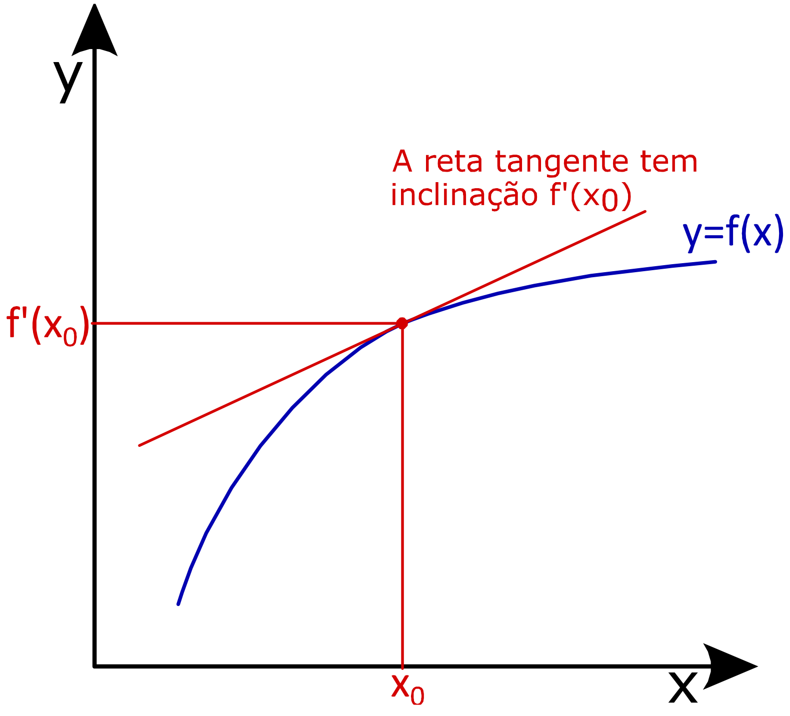
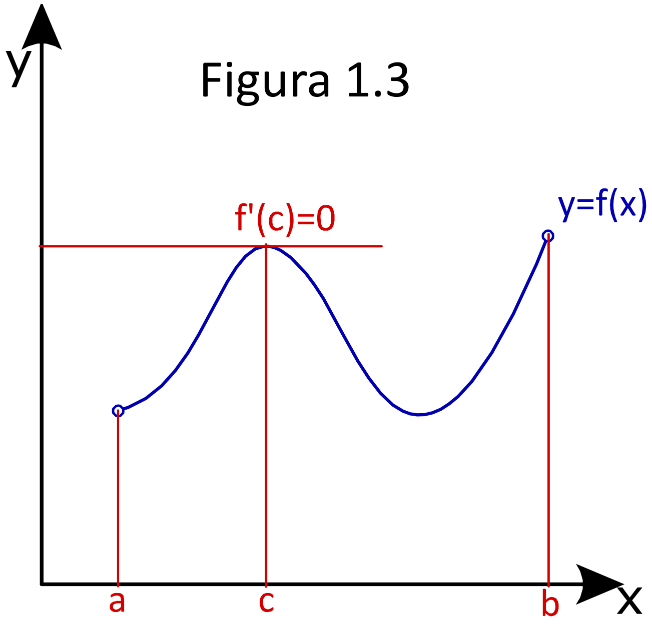


Figura 1.2

1.1.1 – Revisão de Cálculo

- Teorema 1.6: Se a função f for diferenciável em x_0, então f será contínua em x_0.
- Teorema 1.7 (Teorema de Rolle): Suponha que $f \in C[a,b]$ e que f seja diferenciável em (a,b). Se $f(a) = f(b)$, então existe um número c em (a,b) com $f'(c)=0$.

Figura 1.3



- Teorema 1.8 (Teorema do Valor Médio): $f \in C[a,b]$ e f for diferenciável em (a,b), então existe um número c em (a,b) com

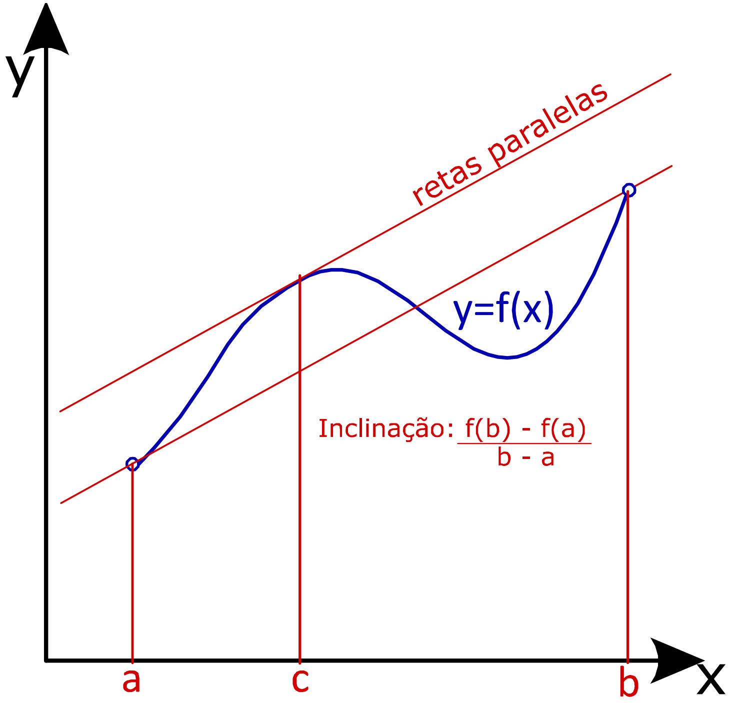
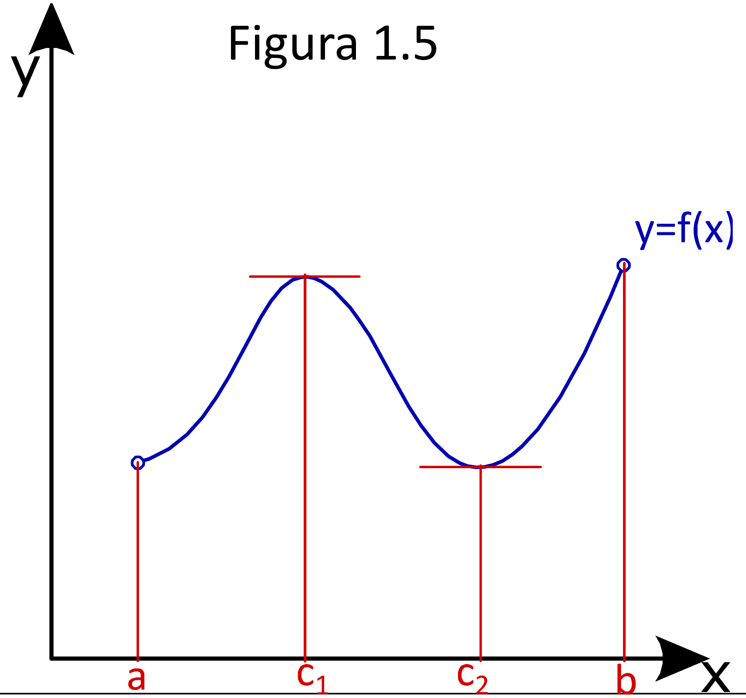


Figura 1.4

$$f'(c) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \qquad (05)$$

- <u>Teorema 1.9</u> (<u>Teorema do Valor Extremo</u>): Se $f \in C[a,b]$, então existem $c_1, c_2 \in [a,b]$ com $f(c_1) \leq f(x) \leq f(c_2)$, para todo $x \in [a,b]$. Além disso, se f for diferenciável em *(a,b)*, então os números c_1 e c_2 ocorrem nas extremidades de *[a,b]* ou nos pontos para os quais *f'* for zero.

Figura 1.5



1.1.1 – Revisão de Cálculo

- <u>Definição 1.10</u> A <u>integral de Riemann</u> da função *f* no intervalo *[a,b]* é o limite seguinte, desde que ele exista:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{max\Delta x_i \to 0} \sum_{i=1}^{n} f(z_i)\,\Delta x_i \qquad (06)$$

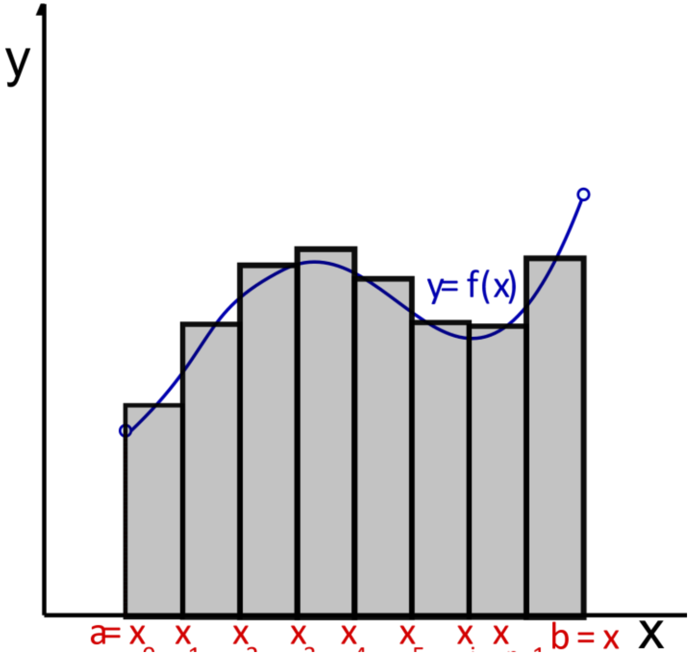


Figura 1.6

onde os números x_0, x_1, ..., x_n satisfazem $a = x_0 \leq x_1 \leq \cdots x_n = b$ e onde $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, para cada *i = 1, 2, ..., n* e z_i arbitrariamente escolhido no intervalo $[x_{i-1}, x_i]$.

Uma função *f* que é <u>contínua</u> em um intervalo *[a,b]* também é integrável, segundo Riemann, em [a,b]. Isso permite escolher, para conveniência de cálculo, que os pontos x_i sejam igualmente espaçados em *[a,b]* e, para cada *i = 1, 2, ..., n*, escolher $z_i = x_i$. Nesse caso:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{n \to \infty} \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \qquad (07)$$

onde $x_i = a + i\,(b-a)/n$

- <u>Teorema 1.11</u> (<u>Teorema do Valor Médio para Integrais com Peso</u>): Suponha que $f \epsilon C[a,b]$, que a integral de Riemann de g exista em *[a,b]* e que *g(x)* não mude de sinal em *[a,b]*. Então, existe um número *c* em *(a,b)* tal que:

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(c)\int_a^b g(x)dx \qquad (08)$$

Quando $g(x) \equiv 1$, o Teorema 1.11 é o usual teorema do valor médio para integrais. Ele fornece o valor médio da função *f* no intervalo *[a,b]* como:

$$f(c) = \frac{1}{b-a}\int_a^b f(x)dx \qquad (09)$$

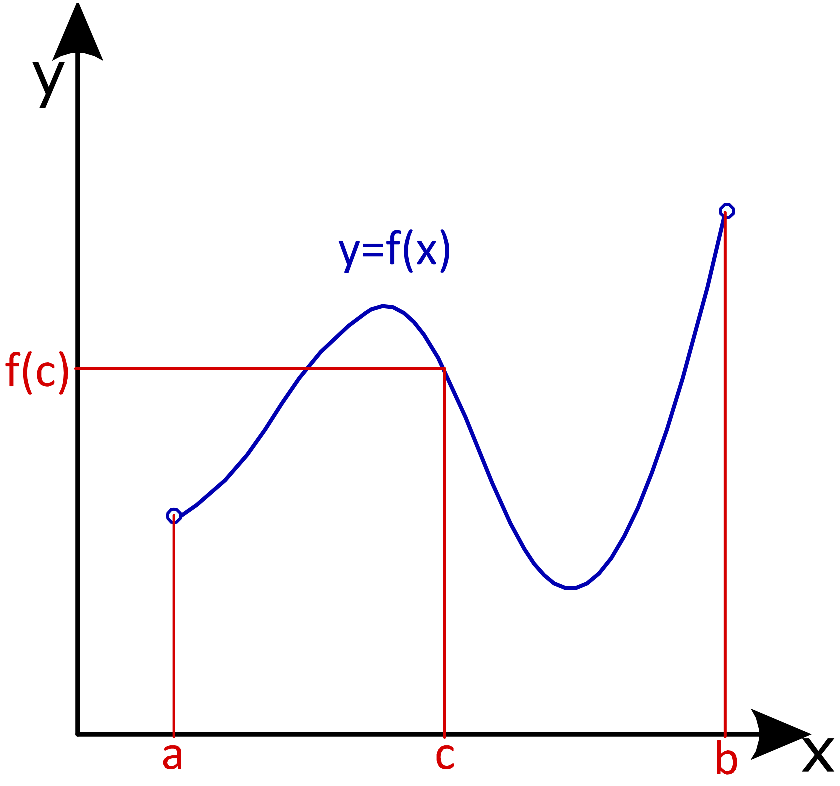


Figura 1.7

- <u>Teorema 1.12</u> (<u>Teorema de Rolle generalizado</u>): Suponha que $f \in C[a,b]$ seja n vezes diferenciável em *(a,b)*. Se *f(x)* for zero em *n+1* <u>números distintos</u> $x_0, ..., x_n$ em *[a,b]*, então existe um número *c* em *(a,b)* com $f^{(n)}(c)=0$.

- <u>Teorema 1.13</u> (<u>Teorema do Valor Intermediário</u>): Se $f \in C[a,b]$ e *k* for qualquer número entre *f(a)* e *f(b)*, então existe um número em *(a,b)* para o qual *f(c)=k*

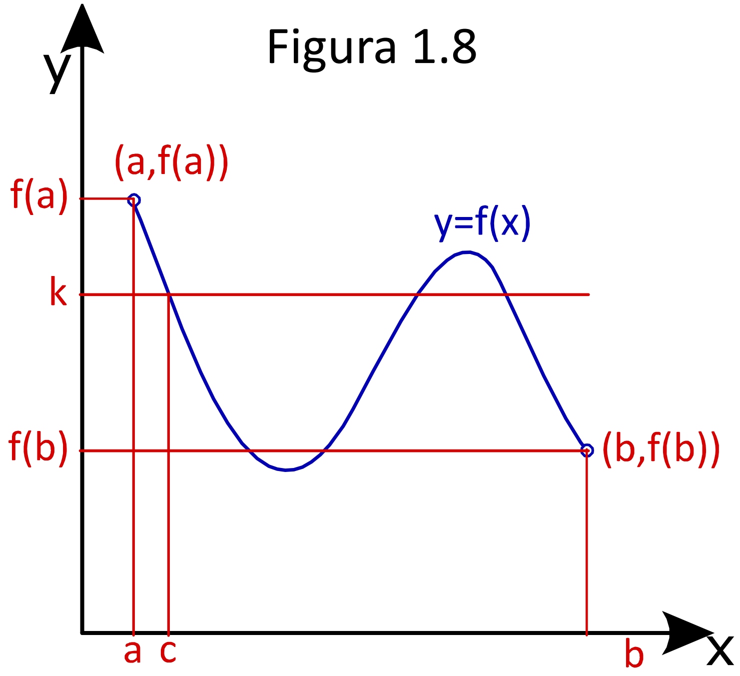


Figura 1.8

1.1.2 – Modelagem Matemática

- Um modelo matemático pode ser definido, de forma geral, como uma formulação ou equação que expressa as <u>características essenciais</u> de um sistema ou processo físico em <u>termos matemáticos</u>. Em um sentido muito geral, ele pode ser representado como uma relação funcional da forma:

$$\text{Variável dependente} = f(\text{variáveis independentes, parâmetros, forçantes}) \tag{10}$$

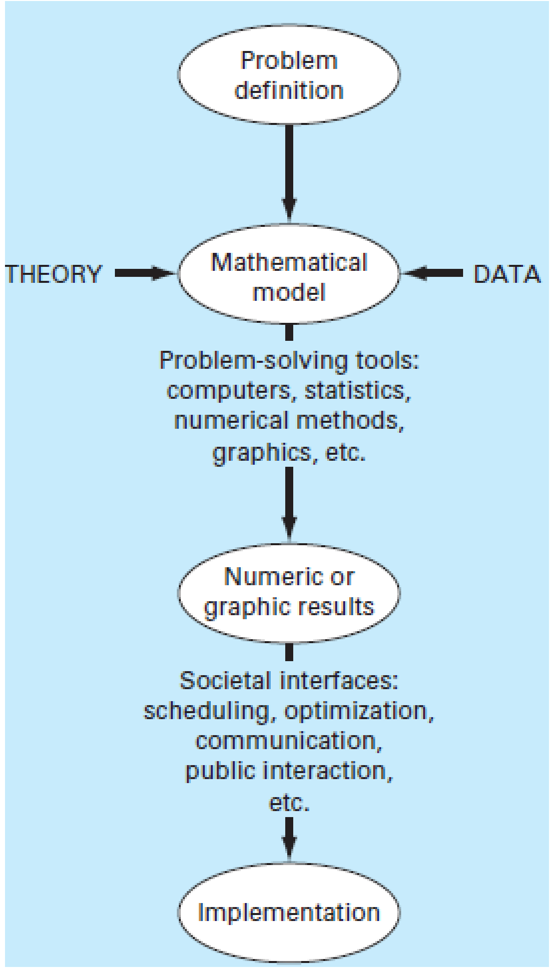


Figura 1.9

1.1.2 – Modelagem Matemática

onde a variável dependente é uma característica que usualmente reflete o comportamento ou estados do sistema. As variáveis independentes usualmente são dimensões, como o tempo e o espaço, ao longo das quais o comportamento do sistema está sendo determinado. Os parâmetros refletem propriedades ou composição do sistema, e os termos forçantes são as influências externas agindo sobre o sistema.

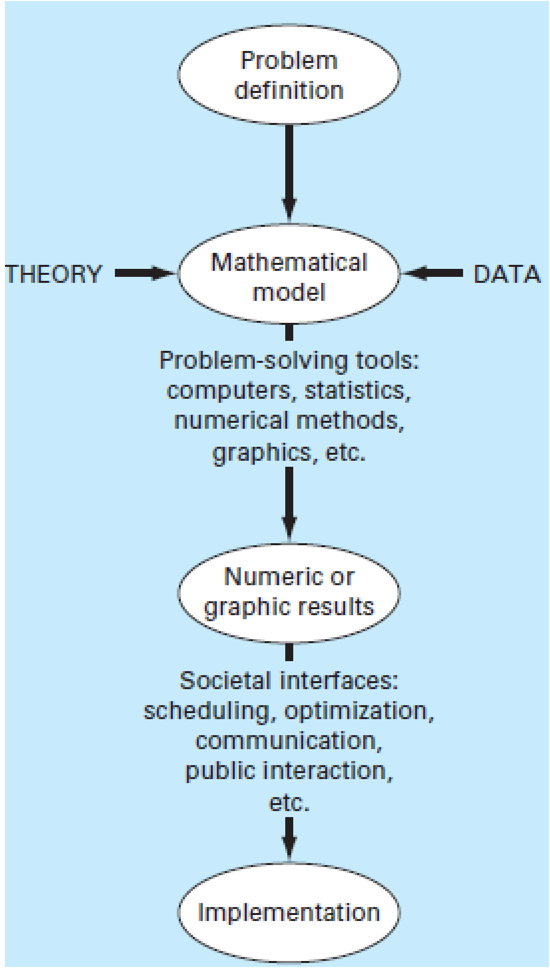


Figura 1.9

1.1.2 – Modelagem Matemática

- A expressão matemática real da relação funcional pode variar de uma simples equação algébrica a um conjunto grande e complicado de equações diferenciais. Por exemplo, com base em suas observações Newton formulou sua segunda Lei do movimento:

$$F = ma \qquad (11)$$

- que escrita na forma da equação (10) se torna

$$a = \frac{F}{m} \qquad (12)$$

- onde a é a variável dependente refletindo o comportamento do sistema, F é o termo forçante e m é um parâmetro representando uma propriedade do sistema.

1.1.2 – Modelagem Matemática

Figura 1.10

- Por causa de sua forma simples, a solução da equação (12) é facilmente obtida. Entretanto, outros modelos matemáticos de fenômenos físicos, podem ser muito mais complexos e/ou não podem ser resolvidos exatamente, ou ainda, exigem técnicas matemáticas mais sofisticadas que a álgebra simples para sua solução. Para ilustrar um modelo mais complexo desse tipo, a segunda Lei de Newton pode ser empregada para determinar a velocidade terminal de um paraquedista. Nesse caso:

$$a = \frac{du}{dt} = \frac{F}{m} \qquad (13)$$

1.1.2 – Modelagem Matemática

- A força resultante F é composta por duas forças opostas: a força gravitacional (FD), orientada para baixo, e a força de resistência do ar (Fu), orientada para cima. Assim:

$$F = F_D + F_u \qquad (14)$$

- Considerando como positiva a força para baixo e utilizando a Segunda Lei de Newton, a força gravitacional pode ser escrita como

$$F_D = mg \qquad (15)$$

1.1.2 – Modelagem Matemática

- A resistência do ar pode ser formulada de diversas maneiras. Uma abordagem simples (mas não necessariamente a mais correta) é assumir que ela é linearmente proporcional à velocidade e age para cima, ou seja,

$$F_u = -cu \tag{16}$$

Deste modo,

$$\frac{du}{dt} = \frac{mg - cu}{m} \tag{17}$$

ou simplificando,

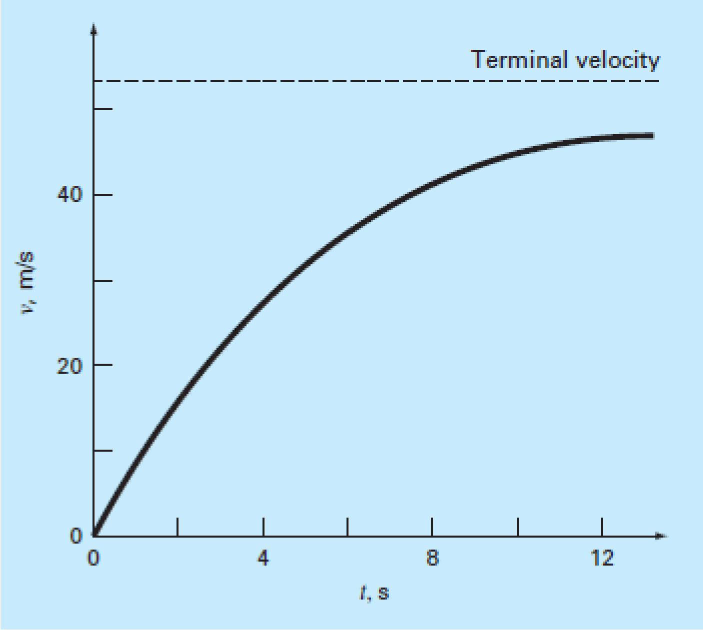
$$\frac{du}{dt} = g - \frac{c}{m}u \tag{18}$$

que se constitui em uma equação diferencial, cuja solução analítica é:

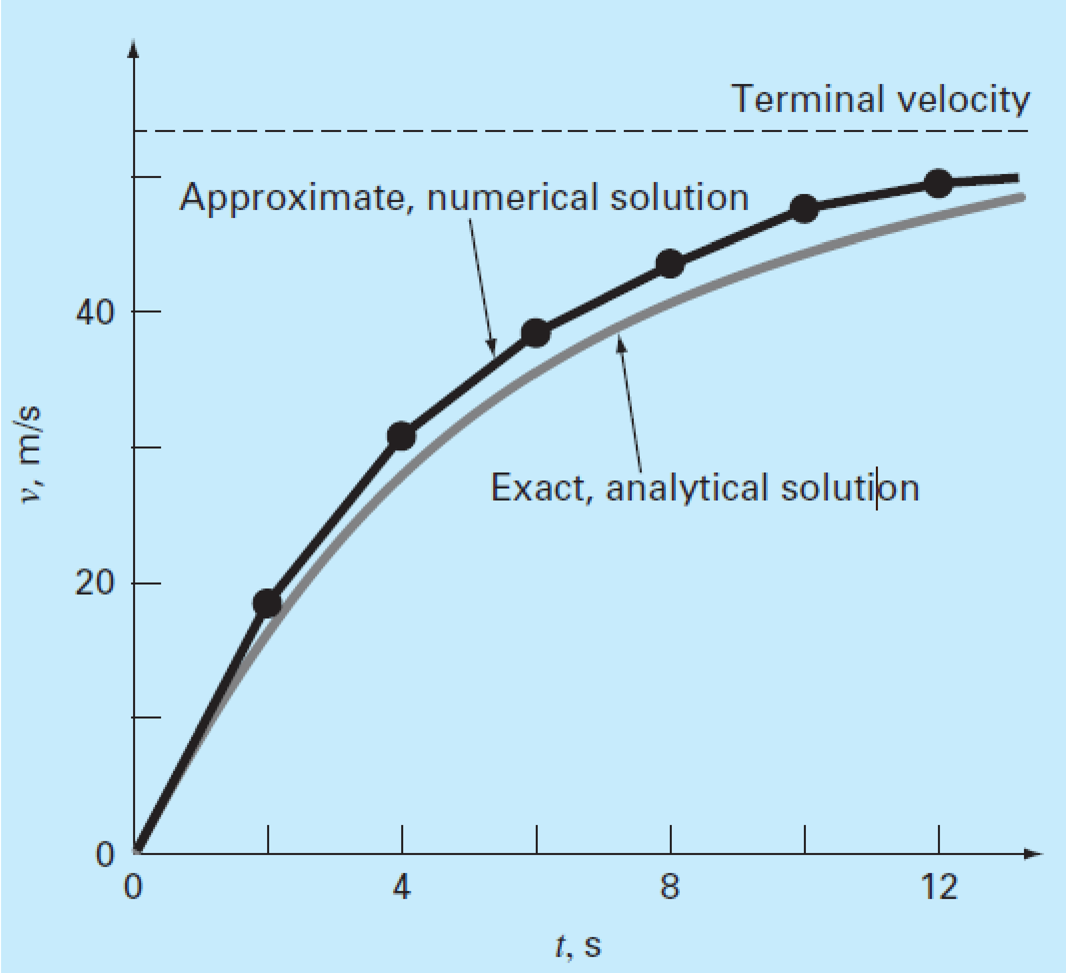
$$u(t) = \frac{gm}{c}\left[1 - e^{-(c/m)t}\right] \tag{19}$$

1.1.2 – Modelagem Matemática

- <u>Exemplo</u>: Um paraquedista de massa 68,1 kg salta de um balão estacionário de ar quente. Utilize a equação (19) para computar a velocidade momentos antes da abertura do paraquedas. O coeficiente de arrasto tem valor de 12,5 kg/s.



1.1.2 – Modelagem Matemática

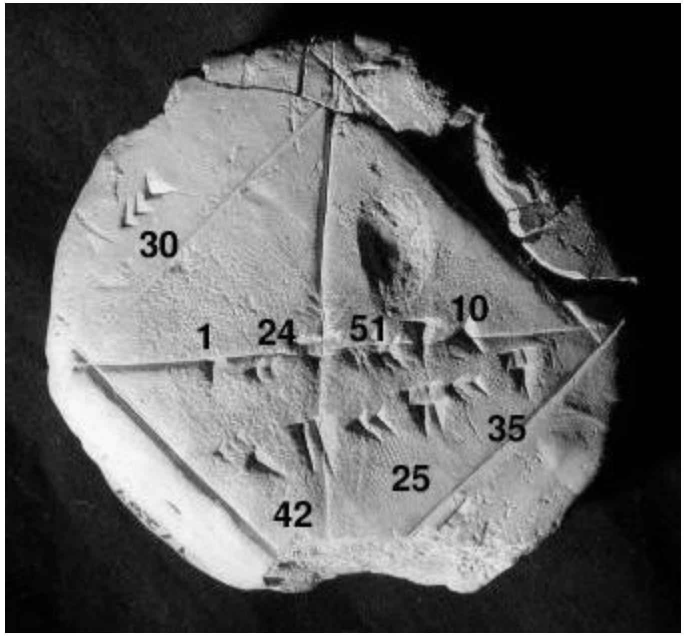


1.1.2 – Modelagem Matemática

- Nota-se, contudo, que a maioria dos modelos matemáticos (que representam fenômenos físicos) não pode ser resolvidas analiticamente. Nesse caso, a única alternativa é desenvolver uma <u>solução numérica</u> que aproxime a solução exata (analítica).
- Métodos numéricos são aqueles nos quais os problemas matemáticos são reformulados de forma que possam ser resolvidos por operações matemáticos.

Características típicas de modelos matemáticos do mundo físico:

1. Descrição de um processo ou sistema natural em termos matemáticos.
2. Idealização e simplificação da realidade. Um modelo ignora detalhes desprezíveis do processo natural e concentra-se em suas manifestações essenciais.
3. Produção de resultados que podem ser reproduzidos e, consequentemente, usados em protótipos de previsão.



Clay tablet Babilônio YBC 7289 (c. 1800–1600 BCE)

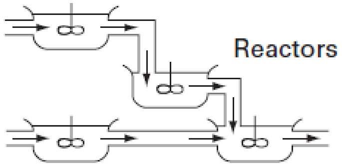
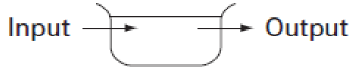
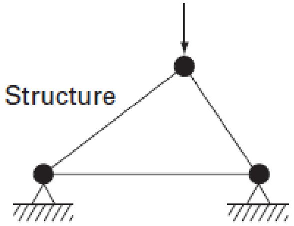
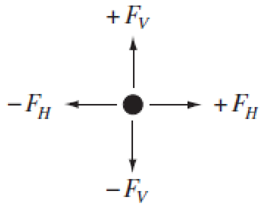
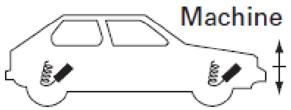
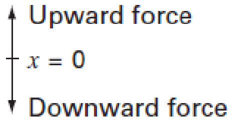
1.1.2 – Modelagem Matemática

- Razões para o estudo de Métodos Numéricos:

1. São ferramentas extremamente poderosas na resolução de problemas: são capazes de lidar com um grande número de equações, não-linearidades e geometrias complexas.
2. Durante a carreira, o profissional de engenharia frequentemente terá ocasião de usar pacotes comercias que envolvem métodos numéricos. O uso inteligente de tais programas, contudo, depende frequentemente do conhecimento da teoria básica fundamental dos métodos.
3. Muitos problemas não podem ser abordados utilizando programas comerciais. Neste caso, torna-se conveniente o projeto do próprio programa para a solução do problema.

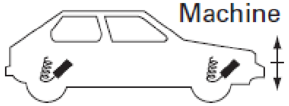
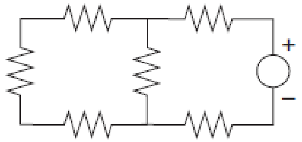
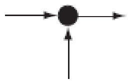
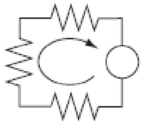
1.1.2 – Modelagem Matemática

- <u>Leis da conservação na engenharia</u>

Field	Device	Organizing Principle	Mathematical Expression
Chemical engineering		Conservation of mass	Mass balance:  Over a unit of time period Δmass = inputs – outputs
Civil engineering		Conservation of momentum	Force balance:  At each node Σ horizontal forces (F_H) = 0 Σ vertical forces (F_V) = 0
Mechanical engineering		Conservation of momentum	Force balance:  $m\dfrac{d^2x}{dt^2}$ = downward force – upward force

1.1.2 – Modelagem Matemática

- <u>Leis da conservação na engenharia</u>

Field	Device	Organizing Principle	Mathematical Expression
Mechanical engineering	Machine 	Conservation of momentum	Force balance: Upward force; $x = 0$; Downward force $m\dfrac{d^2x}{dt^2}$ = downward force – upward force
Electrical engineering	 Circuit	Conservation of charge	Current balance:  For each node Σ current (i) = 0
		Conservation of energy	Voltage balance:  Around each loop Σ emf's – Σ voltage drops for resistors = 0 $\Sigma\,\xi - \Sigma\, iR = 0$

- Definição 1.14: Sejam E um conjunto e k um corpo. Supondo-se que em E esteja definida uma operação de adição

$$x + y \epsilon E \times E \to x + y \in E \tag{20}$$

e que esteja definida uma operação entre os elementos de k e os elementos de E (chamada multiplicação por escalar):

$$(\alpha, x) \in k \times E \to \alpha x \ \in E \tag{21}$$

Então E é um k-espaço vetorial em relação a essas operações se as seguintes condições estiverem satisfeitas:

1.1.3 – Revisão de Álgebra Linear

A1) $x + y = y + x, \forall x \in E$

A2) $(x + y) + z = x + (y + z), \forall x, y, z \in E$

A3) $\exists\ \theta$ (vetor nulo) $\epsilon\ E / x + \theta = \theta + x = x, \forall\ x\ \epsilon\ E$

A4)$\forall\ x\ \epsilon\ E, \exists - x\ \epsilon\ E / x + (-x) = \theta$

m1)$\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y, \forall \alpha \in k, \forall x, y \in E$

m2)$(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x, \forall \alpha, \beta \in k, \forall x \in E$

m3)$(\alpha\beta)\mathrm{x} = \alpha(\beta x), \forall \alpha, \beta \in k, \forall x \in E$

m4)$1. x = x, \forall x \epsilon E$

- Definição 1.15: Seja *E* um espaço vetorial real. Sejam *x,y* elementos de *E*. Chama-se produto escalar (ou produto interno) de *x* por *y* – em símbolo *(x,y)* ou *x.y* – qualquer função definida em $E \times E$ com valores em $\mathbb{R}$, satisfazendo as seguintes propriedades:

P1) $(x, y) = (y, x), \forall x, y \epsilon E$

P2) $(x + y, z) = (x, z) + (y, z), \forall\, x, y, z \ \in E$

P3) $(\lambda x, y) = \lambda(x, y), \forall\, \lambda \epsilon \mathbb{R}, \forall x, y \in E$

P4) $(x, y) \geq 0\ e\ (x, x) = 0\ se\ e\ somente\ se\ x = \theta$

Um espaço vetorial real E onde está definido um produto escalar é chamado espaço vetorial euclidiano real.

1.1.3 – Revisão de Álgebra Linear

- Definição 1.16: Seja *E* um espaço euclidiano real. Sejam *x, y* elementos de E. Diz-se que *x* é ortogonal a *y* – símbolo, $x \perp y$ – se e somente se *(x,y) = 0.*

- Teorema 1.17: Os vetores $v_1, v_2, \cdots, v_m$ tais que

a) $v_i \neq 0, i = 1,2,\cdots,m$

b) $\left(v_i, v_j\right) = 0, para\ i \neq j$

São sempre linearmente independentes. Dito de outro modo: os vetores não-nulos $v_1, v_2, \cdots, v_m$, dois a dois ortogonais, são sempre linearmente independentes.

1.1.3 – Revisão de Álgebra Linear

- Definição 1.18: Seja E um espaço euclidiano de dimensão n. Se $f_1, f_2, \cdots, f_n$ são dois a dois ortogonais, ou seja, se $(v_i, v_j) = 0$, $i \neq j$, eles constituem uma base de E, que será chamada de base ortogonal.

- Teorema 1.19: Em um espaço euclidiano real E, qualquer que sejam x, $y \in E$, tem-se:

$$(x, y)^2 \leq (x, x)(y, y) \tag{22}$$

com a igualdade válida somente se x e y são linearmente dependentes. A desigualdade da equação (22) é chamada de desigualdade de Schwartz.

1.1.3 – Revisão de Álgebra Linear

- <u>Definição 1.20</u>: Chama-se <u>norma</u> de um vetor x – em símbolo, $\|x\|$ - qualquer função definida em um espaço vetorial E, com valores em $\mathbb{R}$, satisfazendo às seguintes condições:

N1) $\|x\| \geq 0 \; e \|x\| = 0$, se e somente se $x = \theta$

N2) $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$, para todo escalar λ.

N3) $\|x + y\| \leq \|x\| \; \|y\|$ (desigualdade triangular)

um espaço vetorial E onde está definida uma norma é chamado espaço vetorial normado.

Sejam $\mathrm{E} = \mathbb{R}^n$ e $\mathrm{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^t$. Definem-se como normas no $\mathbb{R}^n$:

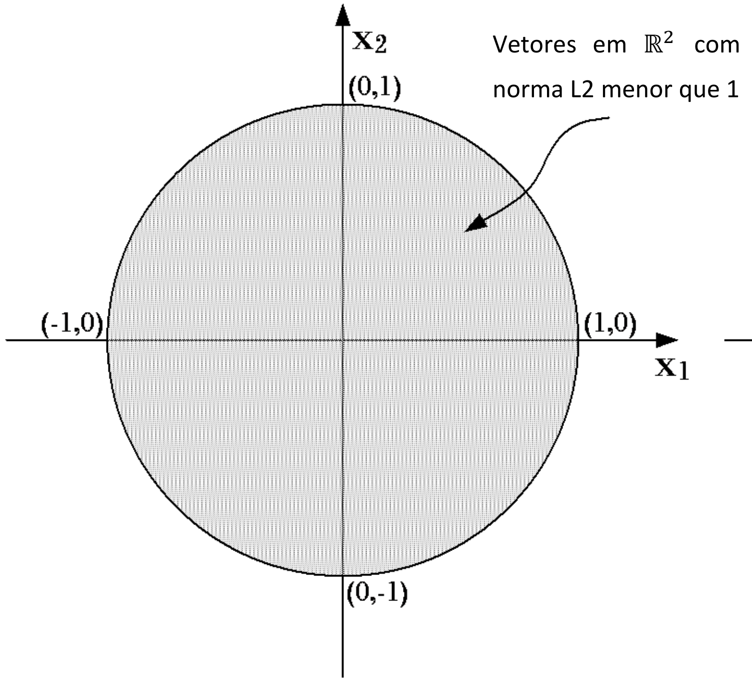
a) Norma infinito: $\|x\|_\infty = \max\limits_{1 \leq i \leq n} |x_i|$ (23)

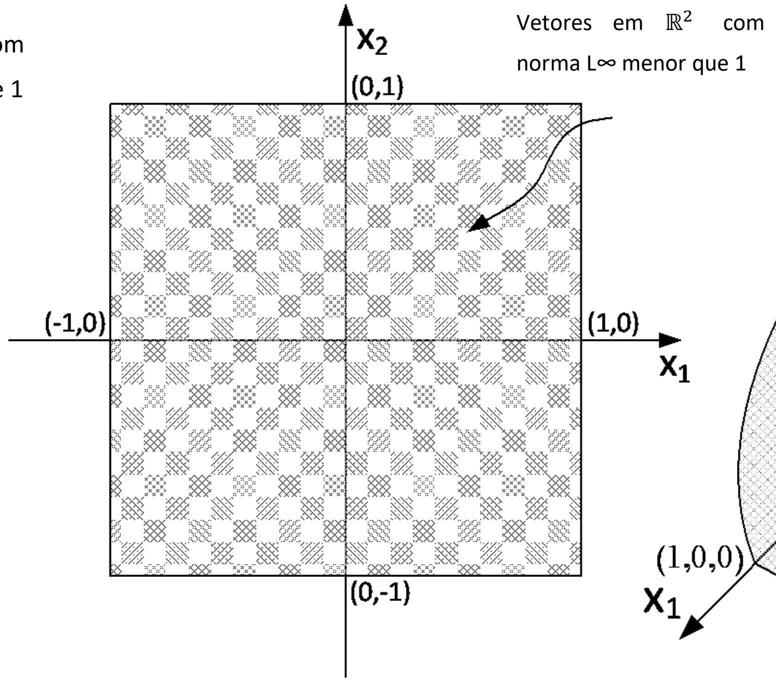
b) Norma L1: $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$ (24)

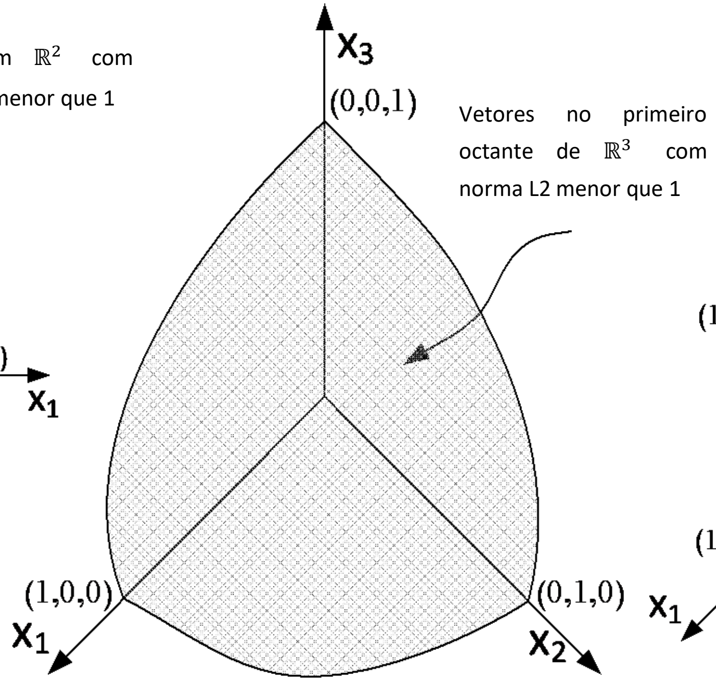
c) Norma L2: $\|x\|_2 = \sqrt{(x, x)}$ (25)

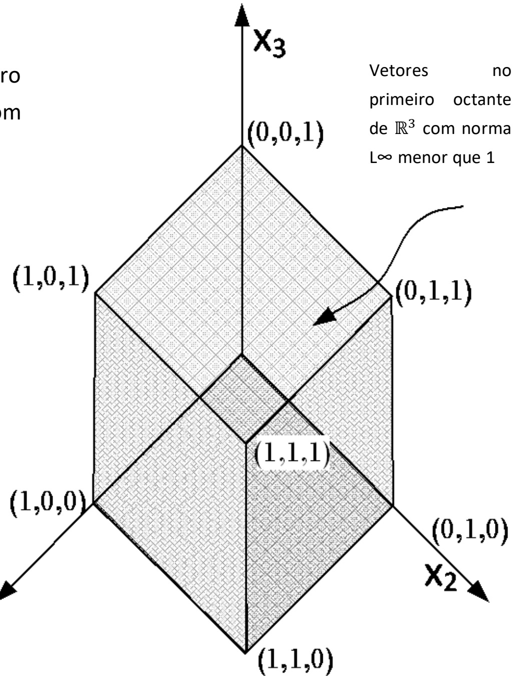
1.1.3 – Revisão de Álgebra Linear

- <u>Observações</u>
- 1) $\|x\|_2 = \|x\| = \sqrt{(x,x)}$ corresponde à noção intuitiva de comprimento ou módulo de um vetor
- 2) Se for utilizada a definição usual de produto escalar no $\mathbb{R}^n$, então $\|x\|_2 = \|x\| = \sqrt{(x,x)} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2} = \|x\|_\varepsilon$, sendo chamada de norma euclidiana.









1.1.3 – Revisão de Álgebra Linear

- <u>Definição 1.21</u>: Duas normas $\|\cdot\|_a$ e $\|\cdot\|_b$ são equivalente se existem constantes k_1 e k_2 tais que:

$$k_1\|x\|_a \leq \|x\|_b \leq k_2\|x\|_a \qquad (26)$$

- <u>Definição 1.22</u>: A desigualdade de Schwarz pode ser escrita como:

$$|(x,y)| \leq \|x\|\|y\| \qquad (27)$$

1.1.3 – Revisão de Álgebra Linear

- Definição 1.21: Chama-se norma de uma matriz A – sem símbolo, $||A||$, qualquer função definida no espaço vetorial das matrizes $n \times n$, com valores em $\mathbb{R}$, satisfazendo as seguintes condições:

m1) $||A|| \geq 0$ e $||A|| = 0$ se e somente se $A = \theta$ (matriz nula)

m2) $||\lambda A|| = |\lambda| ||A||$ para todo escalar λ

m3) $||A + B|| \leq ||A|| + ||B||$ (desigualdade triangular)

m4) $||AB|| \leq ||A|| ||B||$

1.1.3 – Revisão de Álgebra Linear

- Seja A uma matriz $n \times n$. Define-se:

a) Norma linha: $\|A\|_\infty = \max\limits_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$ (28)

b) Norma coluna: $\|A\|_1 = \max\limits_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$ (29)

c) Norma euclidiana ou de Frobenius: $\|A\|_\varepsilon = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2}$ (30)

1.1.3 – Revisão de Álgebra Linear

- Como o caso de vetores, as normas de matrizes também são equivalentes, isto é, satisfazem uma relação do tipo apresentado na Definição 1.21, com o vetor x substituído pela matriz A.
- Deve-se observar, também, que em contraste com o que ocorre para vetores, a norma 2 (L2) e a norma euclidiana de uma matriz não são iguais. Enquanto a norma euclidiana pode ser facilmente determinada através da equação (30), a norma L2 de uma matriz A é calculada como:

$$\|A\|_2 = (\mu_{max})^{1/2} \tag{31}$$

- onde μ_{max} é o maior autovalor de $[A]^T[A]$. Tem-se que $\|A\|_2$ ou norma espectral é a norma mínima e, portanto, fornece a medida mais justa do tamanho.