Introdução ao Curso de Algoritmos Numéricos II / Computação Científica

Lucia Catabriga

luciac@inf.ufes.br

March 5, 2020

Contextualizando a Computação Científica

- O que é Computação Científica

Contextualizando a Computação Científica

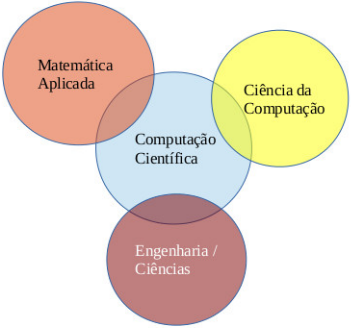
- O que é Computação Científica
  - É uma área multidisciplinar com conexões para ciências, engenharia, matemática e computação.

Contextualizando a Computação Científica

- O que é Computação Científica
  - É uma área multidisciplinar com conexões para ciências, engenharia, matemática e computação.
  - Dedica-se a reconstrução ou predição de fenômenos e processos.

Contextualizando a Computação Científica

- O que é Computação Científica
  - É uma área multidisciplinar com conexões para ciências, engenharia, matemática e computação.
  - Dedica-se a reconstrução ou predição de fenômenos e processos.



Contextualizando a Computação Científica - Técnicas de Solução

Contextualizando a Computação Científica - Técnicas de Solução

- Teórica: Utiliza informações teóricas conhecidas para obter, em geral, uma expressão explícita para a solução de um problema. Ex: $\int_{-1}^{1} x \, dx = \frac{x^2}{2}\Big|_{-1}^{1} = 0$.

Contextualizando a Computação Científica - Técnicas de Solução

- Teórica: Utiliza informações teóricas conhecidas para obter, em geral, uma expressão explícita para a solução de um problema. Ex: $\int_{-1}^{1} x\, dx = \frac{x^2}{2}\Big|_{-1}^{1} = 0.$
- Experimental: Utiliza equipamentos de medição para simular processo físicos nas mais diversas áreas do conhecimento.

Contextualizando a Computação Científica - Técnicas de Solução

- Teórica: Utiliza informações teóricas conhecidas para obter, em geral, uma expressão explícita para a solução de um problema. Ex: $\int_{-1}^{1} x\, dx = \frac{x^2}{2}\Big|_{-1}^{1} = 0.$
- Experimental: Utiliza equipamentos de medição para simular processo físicos nas mais diversas áreas do conhecimento.
- Numérica: Utiliza ferramentas numéricas e computacionais para simular numericamente problemas nas mais diversas áreas do conhecimento.

Contextualizando a Computação Científica

Contextualizando a Computação Científica

- A simulação é hoje em dia um parceiro igual e indispensável no avanço do conhecimento científico junto à investigação teórica e experimental.

Contextualizando a Computação Científica

- A simulação é hoje em dia um parceiro igual e indispensável no avanço do conhecimento científico junto à investigação teórica e experimental.
- Os objetivos dependem da tarefa concreta da simulação:

Contextualizando a Computação Científica

- A simulação é hoje em dia um parceiro igual e indispensável no avanço do conhecimento científico junto à investigação teórica e experimental.
- Os objetivos dependem da tarefa concreta da simulação:
  - reconstruir e compreender cenários conhecidos $\rightarrow$ desastres naturais.

Contextualizando a Computação Científica

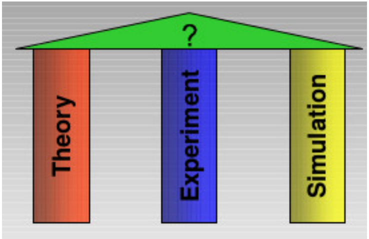
- A simulação é hoje em dia um parceiro igual e indispensável no avanço do conhecimento científico junto à investigação teórica e experimental.
- Os objetivos dependem da tarefa concreta da simulação:
  - reconstruir e compreender cenários conhecidos $\rightarrow$ desastres naturais.
  - otimização de cenários conhecidos $\rightarrow$ processos técnicos.

Contextualizando a Computação Científica

- A simulação é hoje em dia um parceiro igual e indispensável no avanço do conhecimento científico junto à investigação teórica e experimental.
- Os objetivos dependem da tarefa concreta da simulação:
  - reconstruir e compreender cenários conhecidos $\rightarrow$ desastres naturais.
  - otimização de cenários conhecidos $\rightarrow$ processos técnicos.
  - predição de cenários não conhecidos $\rightarrow$ previsão do tempo, estudos de novos materiais.

Contextualizando a Computação Científica

- A simulação é hoje em dia um parceiro igual e indispensável no avanço do conhecimento científico junto à investigação teórica e experimental.
- Os objetivos dependem da tarefa concreta da simulação:
  - reconstruir e compreender cenários conhecidos → desastres naturais.
  - otimização de cenários conhecidos → processos técnicos.
  - predição de cenários não conhecidos → previsão do tempo, estudos de novos materiais.



Contextualizando a Computação Científica

Técnica	Vantagens	Desvantagens
Teórica	mais geral fórmula fechada	restrita a geometrias e processos físicos simples geralmente restrita a problemas lineares
Experimental	mais realista	equipamento exigido problemas de escala dificuldade de medição custo operacional
Numérica	não há restrição à linearidade geometria e problemas complicados evolução temporal do processo	erros de truncamento e arredondamento custos operacionais prescrição das condições de contorno apropriadas

Exemplos de aplicação da Computação Científica

Exemplos de aplicação da Computação Científica

- **dinâmica de fluidos**: a aerodinâmica de carros e aeronaves, processos de combustão, espalhamento de agentes poluentes.

Exemplos de aplicação da Computação Científica

- **dinâmica de fluidos**: a aerodinâmica de carros e aeronaves, processos de combustão, espalhamento de agentes poluentes.
- **tecnologia de semicondutores**: criação de cristais, processos de oxidação;

Exemplos de aplicação da Computação Científica

- **dinâmica de fluidos**: a aerodinâmica de carros e aeronaves, processos de combustão, espalhamento de agentes poluentes.
- **tecnologia de semicondutores**: criação de cristais, processos de oxidação;
- **clima e previsão do clima**: acompanhamento de tornados, aquecimento global;

Exemplos de aplicação da Computação Científica

- **dinâmica de fluidos**: a aerodinâmica de carros e aeronaves, processos de combustão, espalhamento de agentes poluentes.
- **tecnologia de semicondutores**: criação de cristais, processos de oxidação;
- **clima e previsão do clima**: acompanhamento de tornados, aquecimento global;
- **física**: simulações de partículas, dobramento de proteínas, design de drogas.

Exemplos de aplicação da Computação Científica

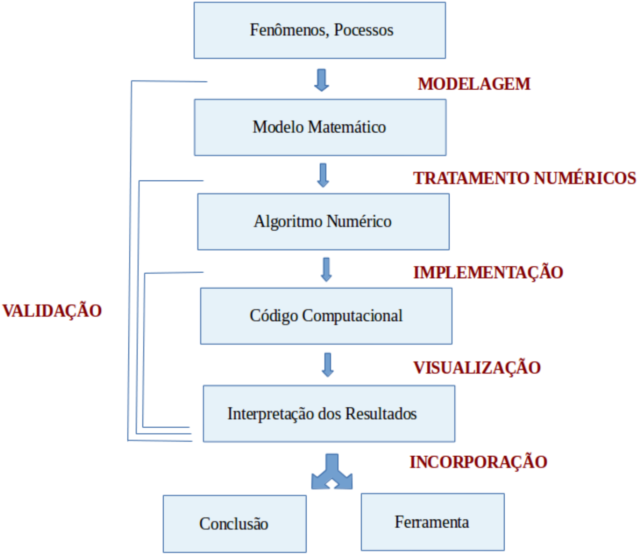
- **dinâmica de fluidos**: a aerodinâmica de carros e aeronaves, processos de combustão, espalhamento de agentes poluentes.
- **tecnologia de semicondutores**: criação de cristais, processos de oxidação;
- **clima e previsão do clima**: acompanhamento de tornados, aquecimento global;
- **física**: simulações de partículas, dobramento de proteínas, design de drogas.
- **matemática financeira**: previsão de preços de ações e de opções aplicações financeiras.

Exemplos de aplicação da Computação Científica

- **dinâmica de fluidos**: a aerodinâmica de carros e aeronaves, processos de combustão, espalhamento de agentes poluentes.
- **tecnologia de semicondutores**: criação de cristais, processos de oxidação;
- **clima e previsão do clima**: acompanhamento de tornados, aquecimento global;
- **física**: simulações de partículas, dobramento de proteínas, design de drogas.
- **matemática financeira**: previsão de preços de ações e de opções aplicações financeiras.

Do fenômeno a predição

Do fenômeno a predição



Modelagem Matemática

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.

Modelagem Matemática

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.
- Problemas na obtenção do modelo matemático:

Modelagem Matemática

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.
- Problemas na obtenção do modelo matemático:
    - Quais quantidades tem influência e o quanto elas são importantes?

Modelagem Matemática

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.
- Problemas na obtenção do modelo matemático:
  - Quais quantidades tem influência e o quanto elas são importantes?
  - Quais relações existem entre elas?

Modelagem Matemática

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.
- Problemas na obtenção do modelo matemático:
  - Quais quantidades tem influência e o quanto elas são importantes?
  - Quais relações existem entre elas?
  - Qual é a tarefa determinante do processo (resolver, otimizar, etc)?

Modelagem Matemática

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.
- Problemas na obtenção do modelo matemático:
  - Quais quantidades tem influência e o quanto elas são importantes?
  - Quais relações existem entre elas?
  - Qual é a tarefa determinante do processo (resolver, otimizar, etc)?
- Problemas na análise do modelo matemático:

Modelagem Matemática

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.
- Problemas na obtenção do modelo matemático:
  - Quais quantidades tem influência e o quanto elas são importantes?
  - Quais relações existem entre elas?
  - Qual é a tarefa determinante do processo (resolver, otimizar, etc)?
- Problemas na análise do modelo matemático:
  - O que pode ser dito sobre a existência e unicidade da solução?

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.
- Problemas na obtenção do modelo matemático:
  - Quais quantidades tem influência e o quanto elas são importantes?
  - Quais relações existem entre elas?
  - Qual é a tarefa determinante do processo (resolver, otimizar, etc)?
- Problemas na análise do modelo matemático:
  - O que pode ser dito sobre a existência e unicidade da solução?
  - Os resultados dependem de que forma dos dados de entrada?

Modelagem Matemática

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.
- Problemas na obtenção do modelo matemático:
    - Quais quantidades tem influência e o quanto elas são importantes?
    - Quais relações existem entre elas?
    - Qual é a tarefa determinante do processo (resolver, otimizar, etc)?
- Problemas na análise do modelo matemático:
    - O que pode ser dito sobre a existência e unicidade da solução?
    - Os resultados dependem de que forma dos dados de entrada?
    - Como a acurácia do modelo pode ser representada?

Modelagem Matemática

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.
- Problemas na obtenção do modelo matemático:
  - Quais quantidades tem influência e o quanto elas são importantes?
  - Quais relações existem entre elas?
  - Qual é a tarefa determinante do processo (resolver, otimizar, etc)?
- Problemas na análise do modelo matemático:
  - O que pode ser dito sobre a existência e unicidade da solução?
  - Os resultados dependem de que forma dos dados de entrada?
  - Como a acurácia do modelo pode ser representada?
  - O modelo é bem-representado pelo tratamento numérico?

Modelagem Matemática

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.
- Problemas na obtenção do modelo matemático:
  - Quais quantidades tem influência e o quanto elas são importantes?
  - Quais relações existem entre elas?
  - Qual é a tarefa determinante do processo (resolver, otimizar, etc)?
- Problemas na análise do modelo matemático:
  - O que pode ser dito sobre a existência e unicidade da solução?
  - Os resultados dependem de que forma dos dados de entrada?
  - Como a acurácia do modelo pode ser representada?
  - O modelo é bem-representado pelo tratamento numérico?
- Não há um único modelo correto, mas vários são possíveis,

Modelagem Matemática

- Modelagem é uma abstração formal (simplificada) da realidade.
- Problemas na obtenção do modelo matemático:
  - Quais quantidades tem influência e o quanto elas são importantes?
  - Quais relações existem entre elas?
  - Qual é a tarefa determinante do processo (resolver, otimizar, etc)?
- Problemas na análise do modelo matemático:
  - O que pode ser dito sobre a existência e unicidade da solução?
  - Os resultados dependem de que forma dos dados de entrada?
  - Como a acurácia do modelo pode ser representada?
  - O modelo é bem-representado pelo tratamento numérico?
- Não há um único modelo correto, mas vários são possíveis,
- Hierarquia do modelo: Acurácia $\times$ Complexidade

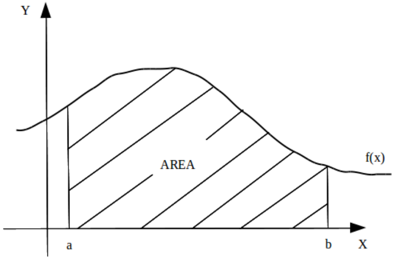
Etapas para uma solução: Exemplo simples

Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Problema Real: Calcular a área sob uma curva.

Etapas para uma solução: Exemplo simples

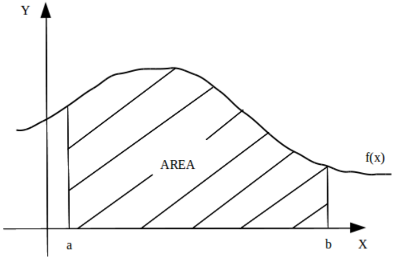
- Problema Real: Calcular a área sob uma curva.



- Modelo Matemático:

Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Problema Real: Calcular a área sob uma curva.



- Modelo Matemático:

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

onde a, b, $f(x)$ são dados conhecidos do problema.

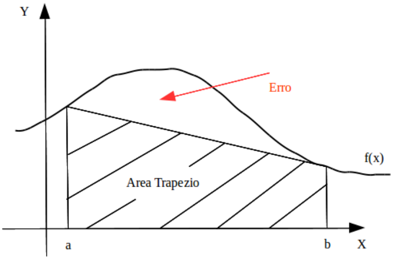
Etapas para uma solução: Exemplo simples

Etapas para uma solução: Exemplo simples

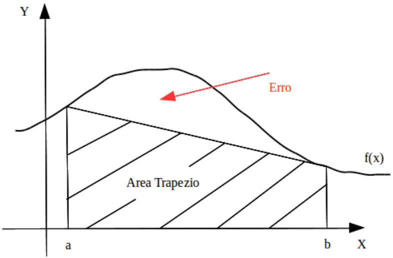
- Algoritmo Numérico:

Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Algoritmo Numérico:



- Algoritmo Numérico:



$$Area = AreaTrapezio + Erro$$

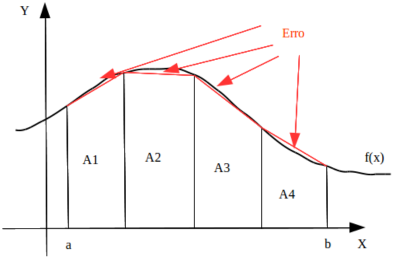
Etapas para uma solução: Exemplo simples

Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Algoritmo Numérico:

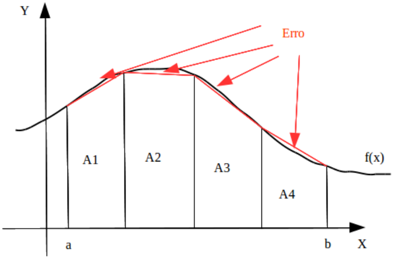
Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Algoritmo Numérico:



Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Algoritmo Numérico:



$$Area = \sum_{n=1}^{4} A_n + Erro$$

Etapas para uma solução: Exemplo simples

Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Código Computacional: usar uma linguagem computacional (C,Fortran,C++,etc) para implementar o modelo numérico.

Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Código Computacional: usar uma linguagem computacional (C,Fortran,C++,etc) para implementar o modelo numérico.
    - Verificação do Algoritmo Computacional: construir, sempre que possível, problemas com solução conhecida e verificar a acurácia da solução aproximada obtida;

Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Código Computacional: usar uma linguagem computacional (C,Fortran,C++,etc) para implementar o modelo numérico.
    - Verificação do Algoritmo Computacional: construir, sempre que possível, problemas com solução conhecida e verificar a acurácia da solução aproximada obtida;
    - Resolução de Aplicações: obter soluções numéricas de problemas de interesse prático.

- Aproximações e compromissos:

- Aproximações e compromissos:
    - Representação de números: número fixos de dígitos ao invés de números reais

- Aproximações e compromissos:
  - Representação de números: número fixos de dígitos ao invés de números reais
  - Representação de funções: aproximações polinomiais ao invés de séries.

- Aproximações e compromissos:
  - Representação de números: número fixos de dígitos ao invés de números reais
  - Representação de funções: aproximações polinomiais ao invés de séries.
  - Representação de domínios: polígonos limitados e representados por pontos fixos.

Simulação Numérica - Tratamento Numérico de Modelos

- Aproximações e compromissos:
  - Representação de números: número fixos de dígitos ao invés de números reais
  - Representação de funções: aproximações polinomiais ao invés de séries.
  - Representação de domínios: polígonos limitados e representados por pontos fixos.
  - Representação de operadores: quocientes de diferenças ao invés de derivações.

Simulação Numérica - Tratamento Numérico de Modelos

- Aproximações e compromissos:
  - Representação de números: número fixos de dígitos ao invés de números reais
  - Representação de funções: aproximações polinomiais ao invés de séries.
  - Representação de domínios: polígonos limitados e representados por pontos fixos.
  - Representação de operadores: quocientes de diferenças ao invés de derivações.
  - Representação de espaços de funções: somente espaços de dimensão finita.

- Requerimentos a serem cumpridos por algoritmos numéricos:

Simulação Numérica - Tratamento Numérico de Modelos

- Requerimentos a serem cumpridos por algoritmos numéricos:
    - Eficiência: elevada acurácia com investimento moderado em armazenamento.

- Requerimentos a serem cumpridos por algoritmos numéricos:
  - Eficiência: elevada acurácia com investimento moderado em armazenamento.
  - Rapidez: solução aproximada é calculada em pouco tempo computacional.

Simulação Numérica - Tratamento Numérico de Modelos

- Requerimentos a serem cumpridos por algoritmos numéricos:
  - Eficiência: elevada acurácia com investimento moderado em armazenamento.
  - Rapidez: solução aproximada é calculada em pouco tempo computacional.
  - Estabilidade: erros qualitativamente pequenos (não significativos) nos resultados.

- Requerimentos a serem cumpridos por algoritmos numéricos:
  - Eficiência: elevada acurácia com investimento moderado em armazenamento.
  - Rapidez: solução aproximada é calculada em pouco tempo computacional.
  - Estabilidade: erros qualitativamente pequenos (não significativos) nos resultados.
  - Robustez: pode ser aplicado para uma classe de problemas mais abrangentes.

- Requerimentos a serem cumpridos por algoritmos numéricos:
  - Eficiência: elevada acurácia com investimento moderado em armazenamento.
  - Rapidez: solução aproximada é calculada em pouco tempo computacional.
  - Estabilidade: erros qualitativamente pequenos (não significativos) nos resultados.
  - Robustez: pode ser aplicado para uma classe de problemas mais abrangentes.
- Principais tarefas:
  - Descrever: equações discretizadas.

- Requerimentos a serem cumpridos por algoritmos numéricos:
  - Eficiência: elevada acurácia com investimento moderado em armazenamento.
  - Rapidez: solução aproximada é calculada em pouco tempo computacional.
  - Estabilidade: erros qualitativamente pequenos (não significativos) nos resultados.
  - Robustez: pode ser aplicado para uma classe de problemas mais abrangentes.
- Principais tarefas:
  - Descrever: equações discretizadas.
  - Solucionar: sistemas resultantes de equações discretas.

$\hat{u}_h$: solução aproximada

u : solução exata

Erros em Computação Científica

$$\hat{u}_h : \text{solução aproximada}$$

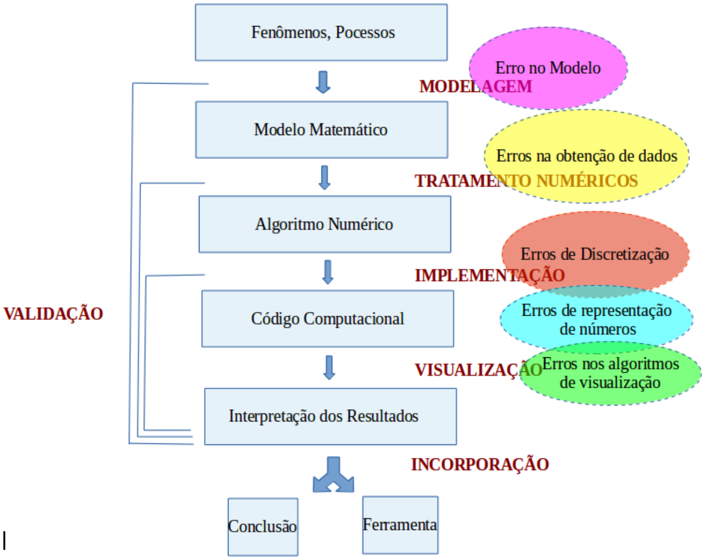
$$u : \text{solução exata}$$

- Medidas de erros:

$$|u - \hat{u}_h| \leq \epsilon \ \text{Erro Absoluto}$$

$$\frac{|u - \hat{u}_h|}{|u|} \leq \epsilon \ \text{Erro Relativo}$$

Erros em Computação Científica



Erros em Computação Científica

1. Erros na Modelagem: erros obtidos pelo uso de dados experimentais errados ou pela própria representação matemática errada de um modelo físico.

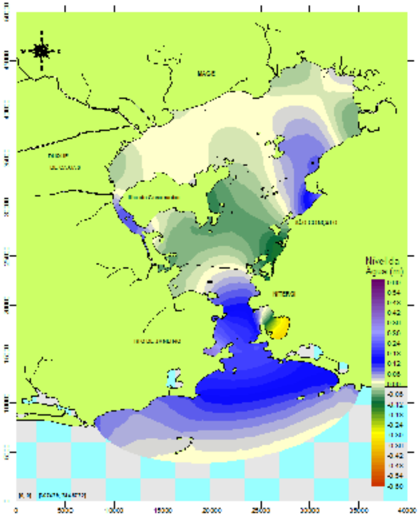
1. Erros na Modelagem: erros obtidos pelo uso de dados experimentais errados ou pela própria representação matemática errada de um modelo físico.
2. Erros de Truncamento: é o erro devido à aproximação de uma fórmula por outra, ou seja, quando são feitas aproximações para representar procedimentos matemáticos exatos. Exemplo: $sen(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}$

Erros em Computação Científica

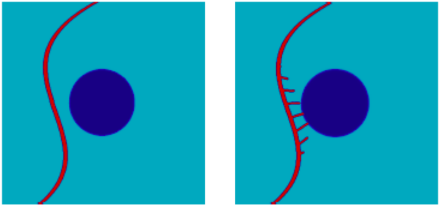
1. Erros na Modelagem: erros obtidos pelo uso de dados experimentais errados ou pela própria representação matemática errada de um modelo físico.
2. Erros de Truncamento: é o erro devido à aproximação de uma fórmula por outra, ou seja, quando são feitas aproximações para representar procedimentos matemáticos exatos. Exemplo: $sen(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}$
3. Erros de Arredondamento (ou de Ponto Flutuante): é o erro causado pela imperfeição na representação de um número, ou seja, quando uma quantidade limitada de algarismos significativos são usados para representar números.

Um exemplo Prático - Tsunami Baía de Guanabara 2004

Um exemplo Prático - Tsunami Baía de Guanabara 2004

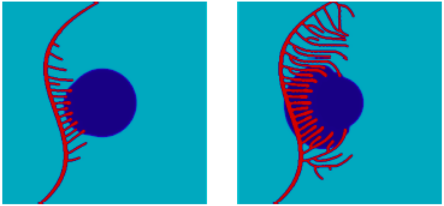


Modelagem do Crescimento Tumoral



(a) Initial configuration of the vessel and tumor.

(b) The new capillary network reaches the tumor.



(c) New capillaries born in the capillary network.

(d) The capillary network involves the tumor.

Fig. 3. The formation of the new capillary network.

Escoamento em uma cavidade bidimensional

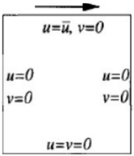
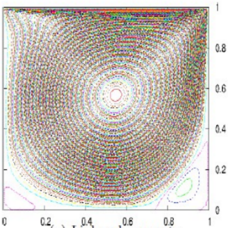
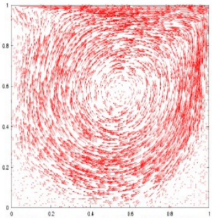


Figura 10: Escoamento em uma cavidade.



(a) Linhas de corrente



(b) Campo de velocidade do fluido

Escoamento sobre um degrau para $Re = 100, 500$ (número de Reynolds)

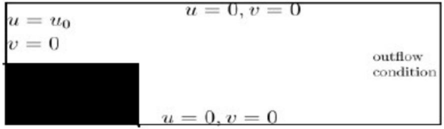
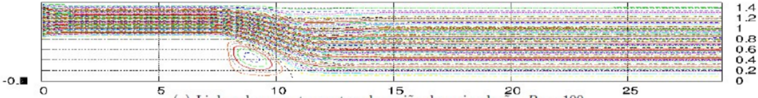
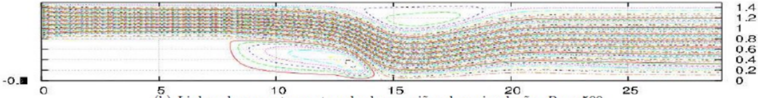


Figura 12: Escoamento sobre um degrau



(a) Linhas de corrente mostrando região de recirculação, $Re = 100$



(b) Linhas de corrente mostrando duas regiões de recirculação, $Re = 500$

Laboratórios e Intituições

Membro:

- Laboratório de Otimização e Modelagem Computacional (LABOTIM/DI/UFES):http://www.labotim.inf.ufes.br/

Colaborações:

- Núcleo Avançado de Computação de Alto Desempenho (NACAD/Coppe/UFRJ): http://www.nacad.ufrj.br/
- Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC/MCTI): http://www.lncc.br/

Prof.: Lucia Catabriga, CT VII sala 06 - tel.: 4009 2160
homepage: www.inf.ufes.br/∼luciac
email: luciac@inf.ufes.br

Ementa

Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias e Parciais: Método de Diferenças Finitas. Métodos Iterativos Não Estacionários de Resolução de Sistemas Lineares, Estudo de Precondicionadores, Métodos de Resolução de Sistemas Não Lineares.

Objetivos

Proporcionar uma visão geral sobre a solução de equações diferenciais via métodos numéricos, enfatizando a solução dos sistemas lineares e não lineares resultantes de discretizações via o método das diferenças finitas. Estudar a solução de sistemas lineares de grande porte por métodos iterativos não estacionários, bem como aceleradores de convergência.

- Solução de Sistemas Lineares
  - Métodos Diretos (Revisão)
  - Métodos Iterativos Estacionários (Revisão)
  - Métodos Iterativos Não-Estacionários
  - Precondicionadores
- Problema de Valor no Contorno - PVC
  - Discretização de equações estacionárias
  - Discretização de equações transientes
  - Discretização de equações multidimensionais
- Solução de Sistemas Não-Lineares
- Outras aplicações na manipulação de matrizes esparsas

Avaliação

Através de Trabalhos Computacionais, Exercícios e Testes:

MédiaParcial =
(MédiaTrabalhos)*0.4+(MédiaTestes)*0.4+(MédiaExercícios)*0.2

Programação das Aulas - Março / Abril

Qui - 05/03	Introdução ao curso	CT IX - S202
Ter - 10/03	Sist. Lineares (SL) - Mét. Diretos e Iterativos (Rev.)	CT IX - S202
Qui - 12/03	SL e Octave	CT IX - LabGrad
Ter - 17/03	SL - Mét. Iterativos Não Estacionários (MINE)	CT IX - S202
Qui - 19/03	SL - MINE - Método dos Gradientes Conjugados (GC)	CT IX - S202
Ter - 24/03	SL - MINE - Método dos Gradientes Conjugados (GC)	CT IX - S202
Qui - 26/03	SL - MINE - Método GMRES	CT IX - S202
Ter - 31/03	SL - MINE - Método GMRES	CT IX - S202
Qui - 02/04	SL - MINE - Método LCD	CT IX - S202
Ter - 07/04	SL - MINE - Precondicionadores	CT IX - S202
Qui - 09/04	SL - MINE - Precondicionadores	CT IX - S202
Ter - 14/04	SL - MINE e Octave	CT IX - LabGrad
Qui - 16/04	Avaliação - Sistemas Lineares	CT IX - S202
Ter - 21/04	Semana do Respiro	
Qui - 23/04	Semana do Respiro	
Ter - 28/04	PVC (1D)	CT IX - S202
Qui - 30/04	PVC (1D) e Octave	CT IX - LabGrad

Programação das Aulas - Maio / Junho / Julho

Ter - 05/05	PVC (2D)	CT IX - S202
Qui - 07/05	PVC (2D)	CT IX - S202
Ter - 12/05	PVC (2D) e Octave	CT IX - LabGrad
Qui - 14/05	PVC Transientes	CT IX - S202
Ter - 19/05	PVC Transientes	CT IX - S202
Qui - 21/05	PVC Transientes e Octave	CT IX - LabGRad
Ter - 26/05	Revisão PVC	CT IX - S202
Qui - 28/05	Avaliação PVC	CT IX - S202
Ter - 02/06	Sistemas não lineares (SNL) (introdução)	CT IX - S202
Qui - 04/06	SNL na Solução de PVC	CT IX - S202
Ter - 09/06	SNL - Método do Ponto Fixo	CT IX - S202
Qui - 11/06	SNL - Método de Newton	CT IX - S202
Ter - 16/06	SNL - Newton Livre de Matriz -JFNK	CT IX - S202
Qui - 18/06	Feriado	
Ter - 23/06	SNL e Octave	CT IX - LabGrad
Qui - 25/06	Método Multigrid	CT IX - S202
Ter - 30/06	Autovalores e Autovetores	CT IX - S202
Qui - 02/07	Autovalores, Autovetores e Octave	CT IX - LabGrad
Ter - 07/07		
Qui - 09/07		