

Introdução ao Curso de Algoritmos Numéricos II / Computação Científica

Lucia Catabriga

luciac@inf.ufes.br

March 12, 2019

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.
- Inclui projeto e análise de algoritmos para resolver numericamente problemas matemáticos em ciência e engenharia.

Contextualizando a Computação Científica

- O que é **Computação Científica**

- É uma área multidisciplinar com conexões para ciências, engenharia, matemática e computação.
- Inclui projeto e análise de algoritmos para resolver numericamente problemas matemáticos em ciência e engenharia.
- É tradicionalmente chamada de análise numérica.

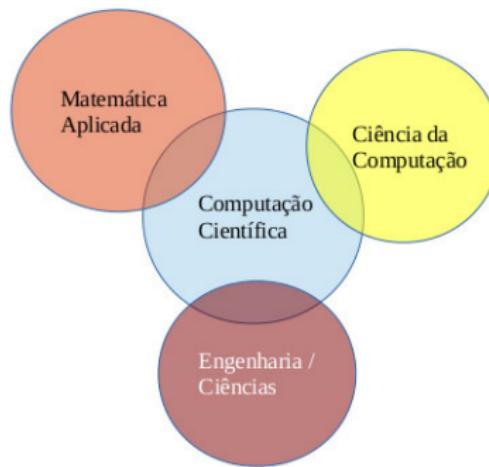
- O que é **Computação Científica**

- É uma área multidisciplinar com conexões para ciências, engenharia, matemática e computação.
- Inclui projeto e análise de algoritmos para resolver numericamente problemas matemáticos em ciência e engenharia.
- É tradicionalmente chamada de análise numérica.
- 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.
- Inclui projeto e análise de algoritmos para resolver numericamente problemas matemáticos em ciência e engenharia.
- É tradicionalmente chamada de análise numérica.
- 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 → desastres naturais.

Contextualizando a Computação Científica

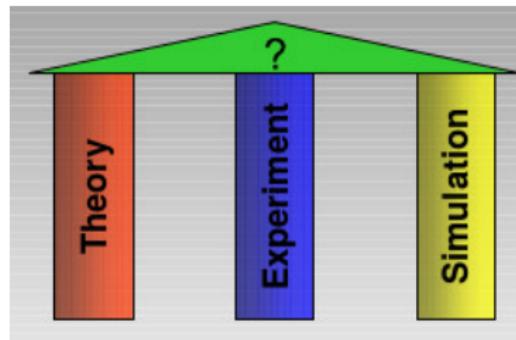
- A simulação é hoje em dia um parceiro igual e indispensável no avanço do conhecimento científico junto à investigação teórica e experimental.
- Os objetivos dependem da tarefa concreta da simulação:
 - reconstruir e compreender cenários conhecidos → desastres naturais.
 - otimização de cenários conhecidos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

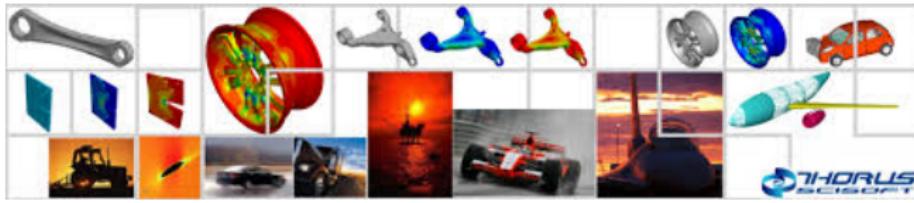
- dinâmica de fluidos: a aerodinâmica de carros e aeronaves, processos de combustão, espalhamento de agentes poluentes.
- tecnologia de semicondutores: criação de cristais, processos de oxidação;
- clima e previsão do clima: acompanhamento de tornados, aquecimento global;
- física: simulações de partículas,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

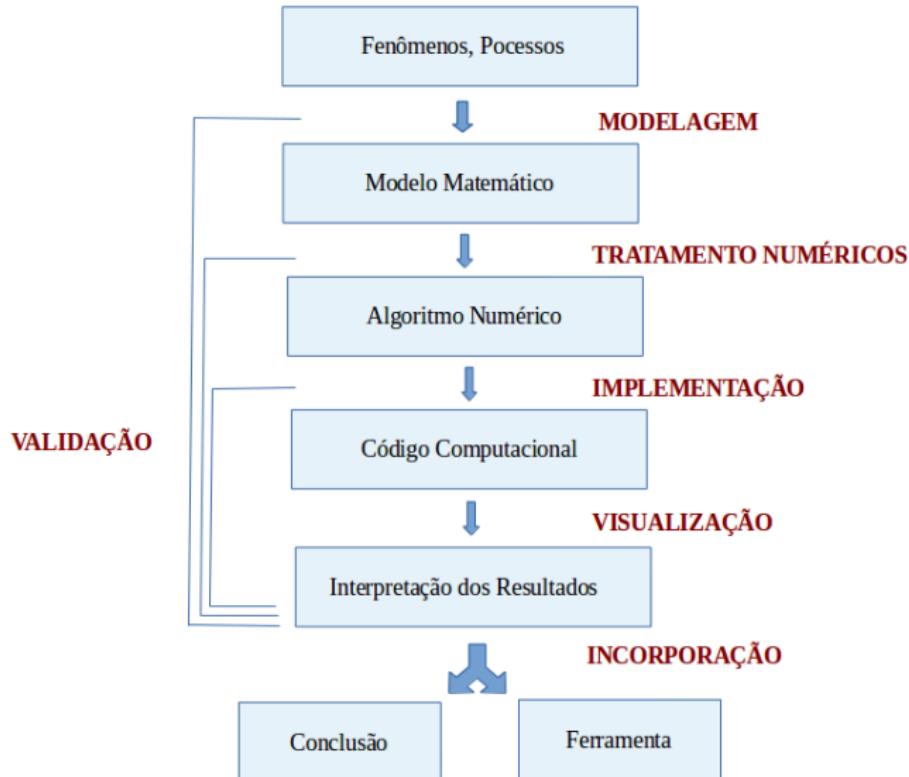
Exemplos de aplicação da Computação Científica

- 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 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 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 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 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 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 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 × Complexidade

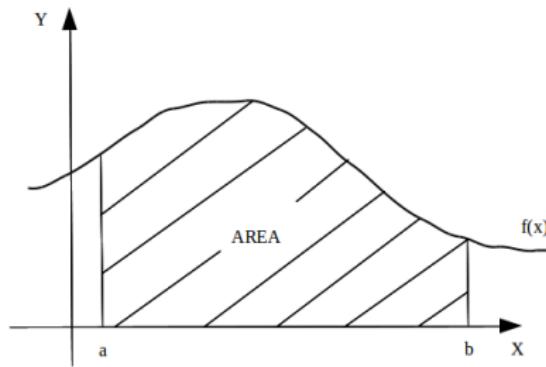
Etapas para uma solução: Exemplo simples

Etapas para uma solução: Exemplo simples

- **Problema Real:** Calcular a área sob uma curva.

Etapas para uma solução: Exemplo simples

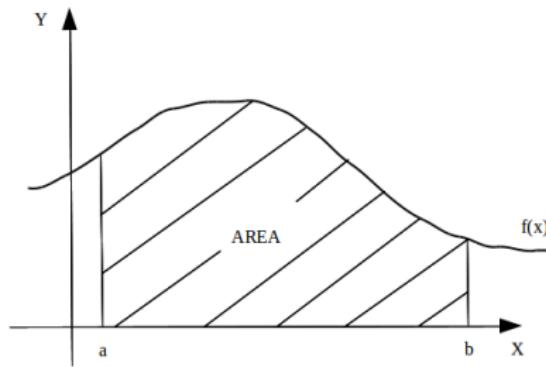
- **Problema Real:** Calcular a área sob uma curva.



- **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.

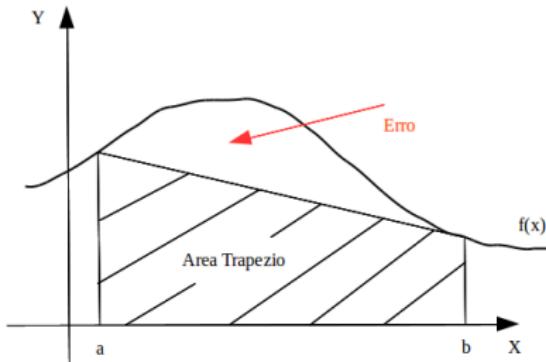
Etapas para uma solução: Exemplo simples

Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Algoritmo Numérico:

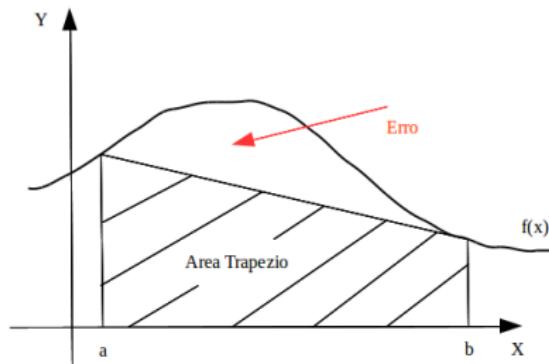
Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Algoritmo Numérico:



Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Algoritmo Numérico:



$$\text{Area} = \text{Area Trapezo} + \text{Erro}$$

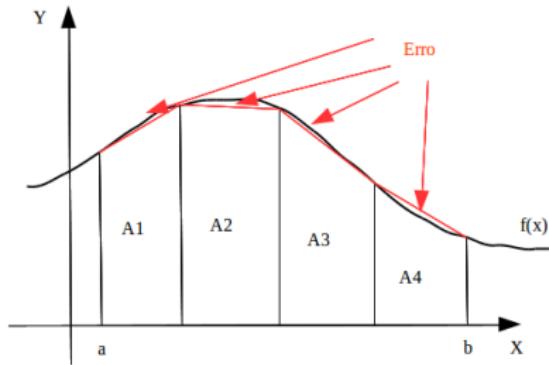
Etapas para uma solução: Exemplo simples

Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Algoritmo Numérico:

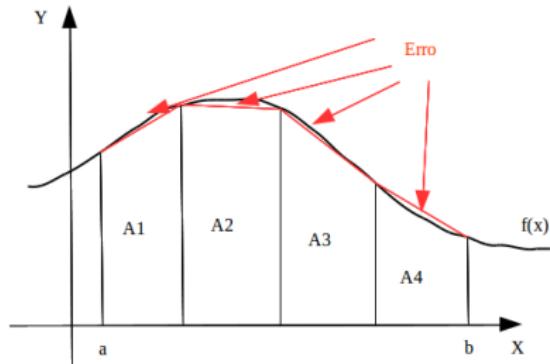
Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Algoritmo Numérico:



Etapas para uma solução: Exemplo simples

- Algoritmo Numérico:



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

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.

Simulação Numérica - Tratamento Numérico de Modelos

- 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.

- 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.

- 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.

Simulação Numérica - Tratamento Numérico de Modelos

- Requerimentos a serem cumpridos por algoritmos numéricos:

- 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.

- 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.

Erros em Computação Científica

\hat{u}_h : solução aproximada

u : solução exata

Erros em Computação Científica

\hat{u}_h : solução aproximada

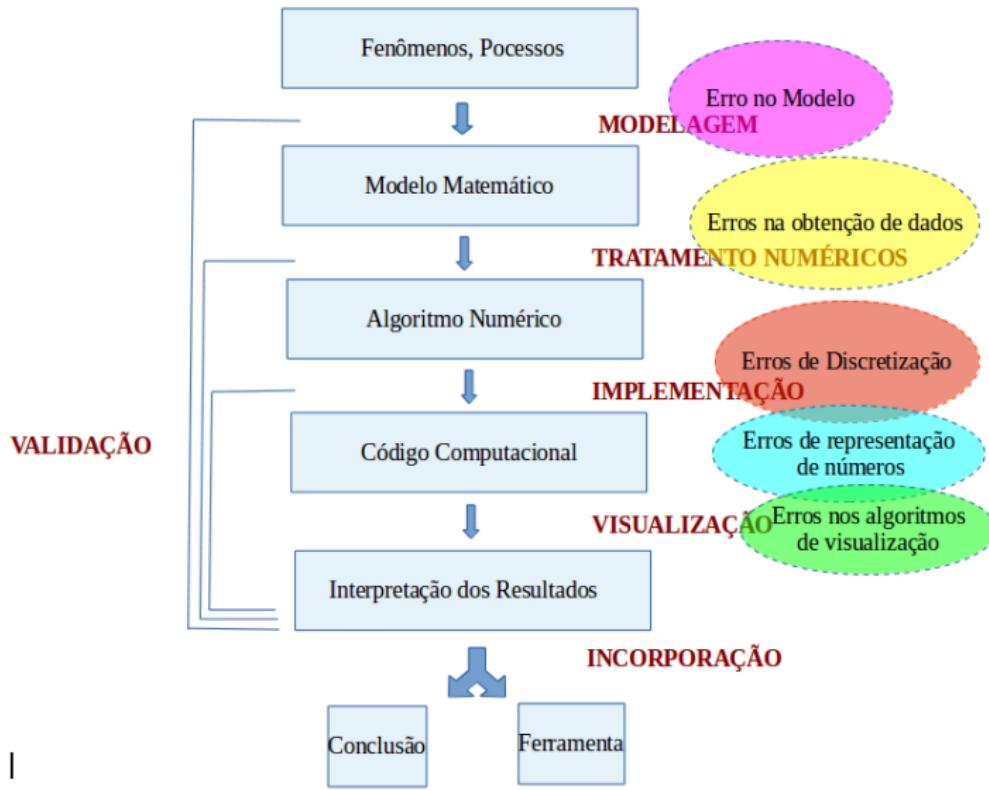
u : solução exata

- 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

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.

Erros em Computação Científica

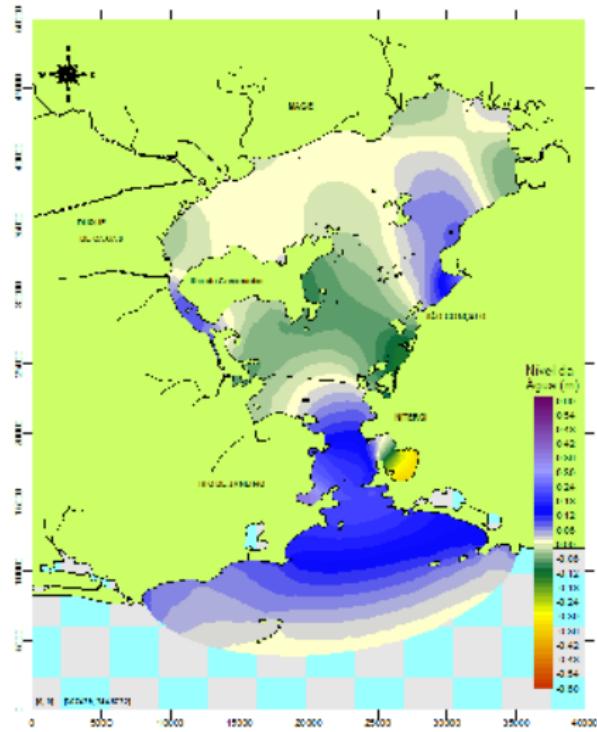
- ① **Erros na Modelagem**: erros obtidos pelo uso de dados experimentais errados ou pela própria representação matemática errada de um modelo físico.
- ② **Erros de Truncamento**: é o erro devido à aproximação de uma fórmula por outra, ou seja, quando são feitas aproximações para representar procedimentos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

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: $\text{sen}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}$
- 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

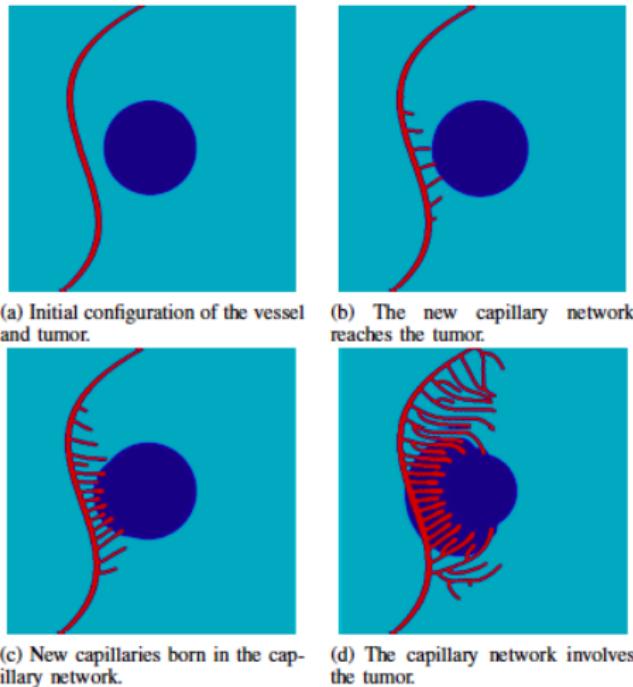


Fig. 3. The formation of the new capillary network.

Escoamento em uma cavidade bidimensional

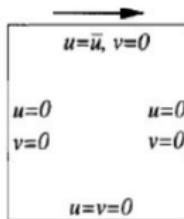
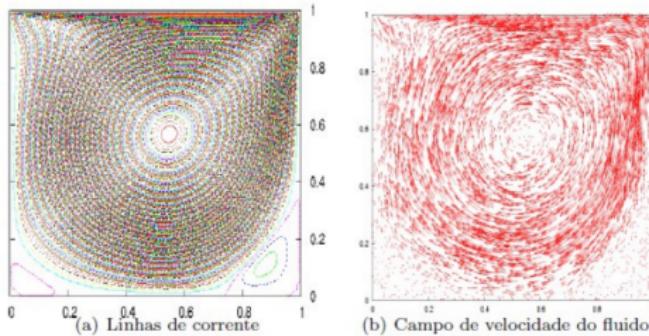


Figura 10: Escoamento em uma cavidade.



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

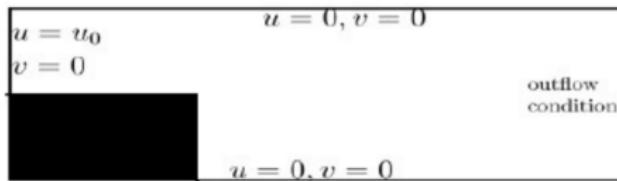
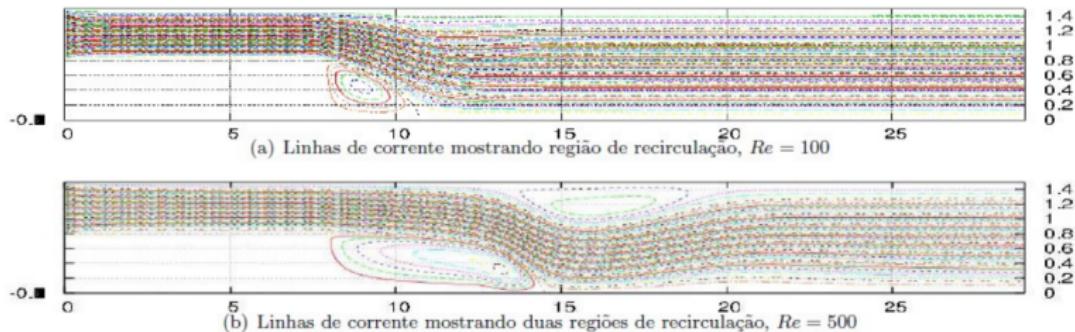


Figura 12: Escoamento sobre um degrau



Laboratórios e Instituições

Membro:

- Laboratório de Computação e Alto Desempenho (LCAD/DI/UFES):
<http://www.lcad.inf.ufes.br/>
- Laboratório de Otimização
(LABOTIM/DI/UFES):
<http://www.labotim.inf.ufes.br/>

Doutorado e Pós-Doutorado:

- Núcleo Avançado de Computação de Alto Desempenho
(NACAD/Coppe/UFRJ): <http://www.nacad.ufrj.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/>

Professor / Ementa / Objetivo

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 não-estacionárias
 - Discretização de equações multidimensionais
- Solução de Sistemas Não-Lineares
- Outras aplicações na manipulação de matrizes esparsas

Avaliação

Através de Trabalhos Computacionais, Exercícios e Testes:

Média Parcial =

$(\text{Média Trabalhos}) * 0.5 + (\text{Média Testes}) * 0.3 + (\text{Média Exercícios}) * 0.2$

Programação das Aulas - Março / Abril

Data	Conteúdo	Local
Ter - 12/03	Introdução, Sistemas Lineares (SL) - Mét. Diretos (revisão)	CT VII - S114
Qui - 14/03	SL - Mét. Iterativos Estacionários (MIE) (revisão)	CT VII - S114
Ter - 19/03	SL e Octave	CT IX - LabGrad
Qui - 21/03	SL - Mét. Iterativos Não Estacionários (MINE)	CT VII - S114
Ter - 26/03	SL - MINE - Método dos Gradientes Conjugados (GC)	CT VII - S114
Qui - 28/03	SL - MINE - Método dos Gradientes Conjugados (GC)	CT VII - S114
Ter - 02/04	SL - MINE - Método GMRES	CT VII - S114
Qui - 04/04	SL - MINE - Método GMRES	CT VII - S114
Ter - 09/04	SL - MINE - Método LCD	CT VII - S114
Qui - 11/04	SL - MINE - Método LCD	CT VII - S114
Ter - 16/04	SL - MINE e Octave	CT IX - LabGrad
Qui - 18/04	SL - MINE - Precondicionadores	CT VII - S114
Ter - 23/04	SL - MINE - Precondicionadores e Octave	CT IX - LabGrad
Qui - 25/04	SL - MINE - Precondicionadores	CT VII - S114
Ter - 30/04	SL - MINE - Precondicionadores	CT IX - LabGrad