

# 16ª Aula - Métodos Numéricos e Optimização (I)

## Programação Mestrado em Engenharia Física Tecnológica

Samuel M. Eleutério  
sme@tecnico.ulisboa.pt

Departamento de Física  
Instituto Superior Técnico  
Universidade de Lisboa

# Métodos Numéricos - Introdução

- A **questão central** do estudo de qualquer **sistema** é (ou tende a ser) a **previsão** do seu **comportamento** em instantes posteriores (ou anteriores) àqueles para os quais dispomos de **informação** – **condições iniciais** (ou **condições fronteiras**).

# Métodos Numéricos - Introdução

- A **questão central** do estudo de qualquer **sistema** é (ou tende a ser) a **previsão** do seu **comportamento** em instantes posteriores (ou anteriores) àqueles para os quais dispomos de **informação** – **condições iniciais** (ou **condições fronteiras**).
- Essa **descrição** pode fazer-se por:

# Métodos Numéricos - Introdução

- A **questão central** do estudo de qualquer **sistema** é (ou tende a ser) a **previsão** do seu **comportamento** em instantes posteriores (ou anteriores) àqueles para os quais dispomos de **informação** – **condições iniciais** (ou **condições fronteiras**).
- Essa **descrição** pode fazer-se por:
  - 1 **Equações Diferenciais**: equações que relacionam as **funções** com as suas **derivadas**, tendo portanto um **carácter local**.

# Métodos Numéricos - Introdução

- A **questão central** do estudo de qualquer **sistema** é (ou tende a ser) a **previsão** do seu **comportamento** em instantes posteriores (ou anteriores) àqueles para os quais dispomos de **informação** – **condições iniciais** (ou **condições fronteiras**).
- Essa **descrição** pode fazer-se por:
  - 1 **Equações Diferenciais**: equações que relacionam as **funções** com as suas **derivadas**, tendo portanto um **carácter local**. São **classificadas** pela derivada de **maior grau** que incluem.

# Métodos Numéricos - Introdução

- A **questão central** do estudo de qualquer **sistema** é (ou tende a ser) a **previsão** do seu **comportamento** em instantes posteriores (ou anteriores) àqueles para os quais dispomos de **informação** – **condições iniciais** (ou **condições fronteiras**).
- Essa **descrição** pode fazer-se por:
  - 1 **Equações Diferenciais**: equações que relacionam as **funções** com as suas **derivadas**, tendo portanto um **carácter local**. São **classificadas** pela derivada de **maior grau** que incluem.
  - 2 **Equações Integrais**: equações que relacionam as **funções** com os seus **integrals**, tendo portanto um **carácter não local** (ou **global**).

# Métodos Numéricos - Introdução

- A **questão central** do estudo de qualquer **sistema** é (ou tende a ser) a **previsão** do seu **comportamento** em instantes posteriores (ou anteriores) àqueles para os quais dispomos de **informação** – **condições iniciais** (ou **condições fronteiras**).
- Essa **descrição** pode fazer-se por:
  - 1 **Equações Diferenciais**: equações que relacionam as **funções** com as suas **derivadas**, tendo portanto um **carácter local**. São **classificadas** pela derivada de **maior grau** que incluem.
  - 2 **Equações Integrais**: equações que relacionam as **funções** com os seus **integrals**, tendo portanto um **carácter não local** (ou **global**).
- Essas duas formulações são **basicamente equivalentes** e a opção por uma ou outra tem essencialmente a ver com o modo como se **adaptam ao problema** em causa.

# Métodos Numéricos - Introdução

- A **questão central** do estudo de qualquer **sistema** é (ou tende a ser) a **previsão** do seu **comportamento** em instantes posteriores (ou anteriores) àqueles para os quais dispomos de **informação** – **condições iniciais** (ou **condições fronteiras**).
- Essa **descrição** pode fazer-se por:
  - 1 **Equações Diferenciais**: equações que relacionam as **funções** com as suas **derivadas**, tendo portanto um **carácter local**. São **classificadas** pela derivada de **maior grau** que incluem.
  - 2 **Equações Integrais**: equações que relacionam as **funções** com os seus **integrals**, tendo portanto um **carácter não local** (ou **global**).
- Essas duas formulações são **basicamente equivalentes** e a opção por uma ou outra tem essencialmente a ver com o modo como se **adaptam ao problema** em causa.
- Aqui vamos limitarmo-nos às **equações diferenciais**.

# Introdução

- Porque **experimentalmente** se verifica que a **força** está directamente relacionada com a **aceleração**, isto é, com a **segunda derivada** do espaço em ordem ao tempo, uma quantidade muito significativa das **equações diferenciais** em Física são de **2ª ordem**.

# Introdução

- Porque **experimentalmente** se verifica que a **força** está directamente relacionada com a **aceleração**, isto é, com a **segunda derivada** do espaço em ordem ao tempo, uma quantidade muito significativa das **equações diferenciais** em Física são de **2ª ordem**.
- Do ponto de vista **prático**, para **cada problema**, temos de responder às seguintes **questões**:

# Introdução

- Porque **experimentalmente** se verifica que a **força** está directamente relacionada com a **aceleração**, isto é, com a **segunda derivada** do espaço em ordem ao tempo, uma quantidade muito significativa das **equações diferenciais** em Física são de **2ª ordem**.
- Do ponto de vista **prático**, para **cada problema**, temos de responder às seguintes **questões**:
  - 1 Que **equação** (em geral, diferencial) deveremos usar para **descrever o problema** em causa;

# Introdução

- Porque **experimentalmente** se verifica que a **força** está directamente relacionada com a **aceleração**, isto é, com a **segunda derivada** do espaço em ordem ao tempo, uma quantidade muito significativa das **equações diferenciais** em Física são de **2ª ordem**.
- Do ponto de vista **prático**, para **cada problema**, temos de responder às seguintes **questões**:
  - 1 Que **equação** (em geral, diferencial) deveremos usar para **descrever o problema** em causa;
  - 2 Que **métodos** podemos usar para **resolver** total ou parcialmente essa **equação** e... **aplicá-los**.

# Introdução

- Porque **experimentalmente** se verifica que a **força** está directamente relacionada com a **aceleração**, isto é, com a **segunda derivada** do espaço em ordem ao tempo, uma quantidade muito significativa das **equações diferenciais** em Física são de **2ª ordem**.
- Do ponto de vista **prático**, para **cada problema**, temos de responder às seguintes **questões**:
  - 1 Que **equação** (em geral, diferencial) deveremos usar para **descrever o problema** em causa;
  - 2 Que **métodos** podemos usar para **resolver** total ou parcialmente essa **equação** e... **aplicá-los**.
- Uma parte muito substancial dos **trabalhos em Física** destina-se a **responder** uma destas questões.

# Introdução

- No nosso caso vamos estar mais interessados na **segunda tarefa**, isto é, uma vez **conhecida** uma certa **equação diferencial**, como podemos obter a sua **solução numérica** a partir das **condições iniciais** específicas do **problema**.

# Introdução

- No nosso caso vamos estar mais interessados na **segunda tarefa**, isto é, uma vez **conhecida** uma certa **equação diferencial**, como podemos obter a sua **solução numérica** a partir das **condições iniciais** específicas do **problema**.
- E, qual o **compromisso** que devemos fazer entre a **precisão dos cálculos**, o **tempo de desenvolvimento**, o **tempo de cálculo** e, de um modo geral, com os **recursos disponíveis**.

# Introdução

- No nosso caso vamos estar mais interessados na **segunda tarefa**, isto é, uma vez **conhecida** uma certa **equação diferencial**, como podemos obter a sua **solução numérica** a partir das **condições iniciais** específicas do **problema**.
- E, qual o **compromisso** que devemos fazer entre a **precisão dos cálculos**, o **tempo de desenvolvimento**, o **tempo de cálculo** e, de um modo geral, com os **recursos disponíveis**.
- Na obtenção de **soluções** existe ainda um **outro problema**: o estabelecimento das **condições fronteiras** (**condições iniciais**). É, em muitos casos, uma questão **bastante difícil** de resolver e **depende**, essencialmente, do **tipo de equação** em causa. Não iremos estudá-la aqui.

# Equações Diferenciais

- Seja a **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

em que 'f(x,t)' é uma **função** de 'x' e de 't'.

# Equações Diferenciais

- Seja a **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

em que 'f(x,t)' é uma **função** de 'x' e de 't'.

- Um **caso simples** e conhecido de todos é (com 'c' constante):

$$\frac{dx}{dt} = c \quad \Rightarrow \quad dx = c dt \quad \Rightarrow \quad x = \int c dt + c_1$$

# Equações Diferenciais

- Seja a **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

em que 'f(x,t)' é uma **função** de 'x' e de 't'.

- Um **caso simples** e conhecido de todos é (com 'c' constante):

$$\frac{dx}{dt} = c \quad \Rightarrow \quad dx = c dt \quad \Rightarrow \quad x = \int c dt + c_1$$

em que **c<sub>1</sub>** é uma **constante de integração** e com **solução**:

$$x(t) = c t + c_1$$

# Equações Diferenciais

- Seja a **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

em que 'f(x,t)' é uma **função** de 'x' e de 't'.

- Um **caso simples** e conhecido de todos é (com 'c' constante):

$$\frac{dx}{dt} = c \quad \Rightarrow \quad dx = c dt \quad \Rightarrow \quad x = \int c dt + c_1$$

em que **c<sub>1</sub>** é uma **constante de integração** e com **solução**:

$$x(t) = c t + c_1$$

- A solução aqui obtida chama-se **solução geral** da **equação diferencial** e descreve os **processos físicos** por ela regidos.

# Equações Diferenciais

- Seja a **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

em que 'f(x,t)' é uma **função** de 'x' e de 't'.

- Um **caso simples** e conhecido de todos é (com 'c' constante):

$$\frac{dx}{dt} = c \quad \Rightarrow \quad dx = c dt \quad \Rightarrow \quad x = \int c dt + c_1$$

em que **c<sub>1</sub>** é uma **constante de integração** e com **solução**:

$$x(t) = c t + c_1$$

- A solução aqui obtida chama-se **solução geral** da **equação diferencial** e descreve os **processos físicos** por ela regidos.
- Ao **particularizar**, adaptam-se as **constantes de integração** a um **problema** específico, obtendo-se uma **solução particular**.

# Equações Diferenciais

- Seja a **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

em que 'f(x,t)' é uma **função** de 'x' e de 't'.

- Um **caso simples** e conhecido de todos é (com 'c' constante):

$$\frac{dx}{dt} = c \quad \Rightarrow \quad dx = c dt \quad \Rightarrow \quad x = \int c dt + c_1$$

em que **c<sub>1</sub>** é uma **constante de integração** e com **solução**:

$$x(t) = c t + c_1$$

- A solução aqui obtida chama-se **solução geral** da **equação diferencial** e descreve os **processos físicos** por ela regidos.
- Ao **particularizar**, adaptam-se as **constantes de integração** a um **problema** específico, obtendo-se uma **solução particular**.
- Designa-se por **fixação** das **condições iniciais** (ou **condições fronteiras**), o processo de obtenção dos valores das **constantes de integração**, que satisfazem um determinado **problema**.

# Declínio Radioactivo

- Um exemplo simples de uma **equação diferencial** é o problema do **declínio radioactivo**:

*Numa dada amostra, é constante a fracção de núcleos que se desintegram por unidade de tempo.*

# Declínio Radioactivo

- Um exemplo simples de uma **equação diferencial** é o problema do **declínio radioactivo**:

*Numa dada amostra, é constante a fracção de núcleos que se desintegram por unidade de tempo.*

- Ou seja,

$$\frac{N(t+\delta t)-N(t)}{\delta t} = -\lambda N(t) \quad \Rightarrow \quad \frac{dN}{dt} = -\lambda N$$

# Declínio Radioactivo

- Um exemplo simples de uma **equação diferencial** é o problema do **declínio radioactivo**:

*Numa dada amostra, é constante a fracção de núcleos que se desintegram por unidade de tempo.*

- Ou seja,

$$\frac{N(t+\delta t) - N(t)}{\delta t} = -\lambda N(t) \quad \Rightarrow \quad \frac{dN}{dt} = -\lambda N$$

- **Resolvendo:**

$$\frac{dN}{N} = -\lambda dt \quad \Rightarrow \quad \ln(N) - \ln(N_o) = \ln\left(\frac{N}{N_o}\right) = -\lambda (t - t_o)$$

# Declínio Radioactivo

- Um exemplo simples de uma **equação diferencial** é o problema do **declínio radioactivo**:

*Numa dada amostra, é constante a fracção de núcleos que se desintegram por unidade de tempo.*

- Ou seja,

$$\frac{N(t+\delta t)-N(t)}{\delta t} = -\lambda N(t) \quad \Rightarrow \quad \frac{dN}{dt} = -\lambda N$$

- **Resolvendo:**

$$\frac{dN}{N} = -\lambda dt \quad \Rightarrow \quad \ln(N) - \ln(N_o) = \ln\left(\frac{N}{N_o}\right) = -\lambda(t - t_o)$$

Aplicando a **função exponencial** e fazendo  **$t_o = 0$** , tem-se:

$$N = N_o e^{-\lambda t}$$

# Declínio Radioativo

- Um exemplo simples de uma **equação diferencial** é o problema do **declínio radioativo**:

*Numa dada amostra, é constante a fracção de núcleos que se desintegram por unidade de tempo.*

- Ou seja,

$$\frac{N(t+\delta t) - N(t)}{\delta t} = -\lambda N(t) \quad \Rightarrow \quad \frac{dN}{dt} = -\lambda N$$

- Resolvendo:**

$$\frac{dN}{N} = -\lambda dt \quad \Rightarrow \quad \ln(N) - \ln(N_o) = \ln\left(\frac{N}{N_o}\right) = -\lambda(t - t_o)$$

Aplicando a **função exponencial** e fazendo  **$t_o = 0$** , tem-se:

$$N = N_o e^{-\lambda t}$$

- Define-se **vida média** ( $\tau$ ) de uma substância radioactiva como o **intervalo de tempo** necessário para que uma dada quantidade de núcleos dessa substância se **reduza a metade**:

$$\frac{N_o}{2} = N_o e^{-\lambda t_{1/2}} \quad \Rightarrow \quad \tau = t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

# Declínio Radioactivo - Resolução Numérica ( 'Prog30\_01.c' )

- Para se fazer a **resolução numérica** do **declínio radioactivo** vamos recorrer à **expressão inicial** que vimos anteriormente:

$$\frac{N(t+\delta t) - N(t)}{\delta t} = -\lambda N(t)$$

# Declínio Radioactivo - Resolução Numérica ( 'Prog30\_01.c' )

- Para se fazer a **resolução numérica** do **declínio radioactivo** vamos recorrer à **expressão inicial** que vimos anteriormente:

$$\frac{N(t+\delta t)-N(t)}{\delta t} = -\lambda N(t)$$

e explicitemos o **número de núcleos** no instante '**t + δt**' em **função** dos valores no instante '**t**':

$$N(t + \delta t) = N(t) - \lambda N(t) \delta t$$

# Declínio Radioactivo - Resolução Numérica ( 'Prog30\_01.c' )

- Para se fazer a **resolução numérica** do **declínio radioactivo** vamos recorrer à **expressão inicial** que vimos anteriormente:

$$\frac{N(t+\delta t)-N(t)}{\delta t} = -\lambda N(t)$$

e explicitemos o **número de núcleos** no instante '**t + δt**' em **função** dos valores no instante '**t**':

$$N(t + \delta t) = N(t) - \lambda N(t) \delta t$$

- Ou seja, o **número de núcleos** no instante '**t + δt**' é igual ao número de núcleos no instante '**t**' menos '**λ N(t) δt**'.

# Declínio Radioativo - Resolução Numérica ( 'Prog30\_01.c' )

- Para se fazer a **resolução numérica** do **declínio radioativo** vamos recorrer à **expressão inicial** que vimos anteriormente:

$$\frac{N(t+\delta t)-N(t)}{\delta t} = -\lambda N(t)$$

e explicitemos o **número de núcleos** no instante '**t + δt**' em **função** dos valores no instante '**t**':

$$N(t + \delta t) = N(t) - \lambda N(t) \delta t$$

- Ou seja, o **número de núcleos** no instante '**t + δt**' é igual ao número de núcleos no instante '**t**' menos '**λ N(t) δt**'.
- Assim, a **expressão** da **lei do declínio** fornece-nos a **forma explícita** para fazer a sua **implementação numérica**.

# Equação Diferencial de 1ª Ordem - Método de Euler

**Generalizando os resultados** anteriormente exemplificados para o declínio radioactivo:

# Equação Diferencial de 1ª Ordem - Método de Euler

**Generalizando os resultados** anteriormente exemplificados para o **declínio radioactivo**:

- Seja uma **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

# Equação Diferencial de 1ª Ordem - Método de Euler

**Generalizando os resultados** anteriormente exemplificados para o **declínio radioactivo**:

- Seja uma **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

podemos **discretizá-la**:

$$\frac{x(t+\delta t) - x(t)}{\delta t} = f(x(t), t)$$

# Equação Diferencial de 1ª Ordem - Método de Euler

**Generalizando os resultados** anteriormente exemplificados para o **declínio radioactivo**:

- Seja uma **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

podemos **discretizá-la**:

$$\frac{x(t+\delta t) - x(t)}{\delta t} = f(x(t), t)$$

- **Explicitando** o valor de '**x**' no instante '**t + δt**':

$$x(t + \delta t) = x(t) + f(x(t), t) \delta t$$

# Equação Diferencial de 1ª Ordem - Método de Euler

**Generalizando os resultados** anteriormente exemplificados para o **declínio radioactivo**:

- Seja uma **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

podemos **discretizá-la**:

$$\frac{x(t+\delta t) - x(t)}{\delta t} = f(x(t), t)$$

- **Explicitando** o valor de '**x**' no instante '**t + δt**':

$$x(t + \delta t) = x(t) + f(x(t), t) \delta t$$

- A expressão anterior fornece um **método** para **resolver iterativamente** a **equação diferencial**.

# Equação Diferencial de 1ª Ordem - Método de Euler

**Generalizando os resultados** anteriormente exemplificados para o **declínio radioactivo**:

- Seja uma **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

podemos **discretizá-la**:

$$\frac{x(t+\delta t) - x(t)}{\delta t} = f(x(t), t)$$

- **Explicitando** o valor de '**x**' no instante '**t + δt**':

$$x(t + \delta t) = x(t) + f(x(t), t) \delta t$$

- A expressão anterior fornece um **método** para **resolver iterativamente** a **equação diferencial**.
- A este **algoritmo** chama-se **método de Euler**.

# Equação Diferencial de 1ª Ordem - Método de Euler

**Generalizando os resultados** anteriormente exemplificados para o **declínio radioactivo**:

- Seja uma **equação diferencial de 1ª ordem**:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

podemos **discretizá-la**:

$$\frac{x(t+\delta t) - x(t)}{\delta t} = f(x(t), t)$$

- **Explicitando** o valor de '**x**' no instante '**t + δt**':

$$x(t + \delta t) = x(t) + f(x(t), t) \delta t$$

- A expressão anterior fornece um **método** para **resolver iterativamente** a **equação diferencial**.
- A este **algoritmo** chama-se **método de Euler**.
- Como já vimos, para outros cálculos, a **escala do acréscimo** '**δt**' é **essencial** para se terem **bons resultados**. Há que obter um **equilíbrio** entre a **precisão** dos cálculos e a sua **eficiência**.