DESENVOLVIMENTO DE INTERFACES DIDÁTICAS APLICADAS A MÉTODOS NUMÉRICOS

Hiego Cândido Silva Costa; Adalício Uzêda Antunes Júnior; Heleno Bispo da Silva Júnior

Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, Unidade Acadêmica de Engenharia Química, hiego_costa@hotmail.com.

Metodologias de ensino, em cursos de engenharia química, têm como grande aliado os avanços tecnológicos. Softwares de programação de propósito geral são utilizados como principal apoio para o aprendizado. Contudo, grandes desafios ainda são encontrados para a consolidação de conceitos e metodologias transmitidos, os quais podem ser minimizados com auxílio de módulos didáticos. Tais módulos facilitam a visualização e entendimento das metodologias apresentadas durante as aulas. Deve-se ressaltar que a boa preparação, principalmente dos conhecimentos básicos, será o diferencial para formação do futuro engenheiro. Tem-se nos métodos numéricos toda a base necessária para resolução de problemas de engenharia, uma vez que quase todos os fenômenos envolvidos nos processos químicos apresentam alto grau de não linearidade. Dessa forma, utilizando a plataforma MATLAB® – GUIDE, scripts de métodos numéricos foram desenvolvidos, e através de interfaces homem-máquina torna-se possível utilizá-los sem alto grau de conhecimento em programação computacional. O módulo desenvolvido possibilita a visualização dos principais métodos numéricos disponíveis. O desenvolvimento de tais métodos é facilmente acessado pelo usuário, que acompanhará graficamente a execução. Além da total interatividade, o módulo permite que várias opções sejam alteradas, dentre elas, a equação a ser analisada, o método para achar raízes ou pontos ótimos, etc. Por fim, o usuário percebe a eficiência de resolução de cada método, podendo avaliar os que apresentam menor esforço computacional, adquirindo assim maior sensibilidade para resolução de problemas. Pode-se concluir que a ferramenta tem grande aplicação didática, possibilitando a visualização e maior entendimento, promovendo assim uma melhor formação para o futuro engenheiro.

Palavras-chave: Métodos numéricos, MATLAB®, GUIDE, Interface Homem-Máquina.

1 INTRODUÇÃO

A tecnologia voltada para resolução de problemas matemáticos avança rapidamente, e permite a utilização constante de diversos softwares na área acadêmica e profissional. Se adequando a esse avanço, o desenvolvimento de novos aplicativos se torna indispensável para busca da expansão do entendimento sobre conceitos teóricos aplicados e capacidade de interpretação dos alunos em problemas cotidianos da engenharia.

Atualmente, o desenvolvimento das ferramentas computacionais possibilita a incorporação da simulação numérica como método de ensino (BELHOT *et al*., 2001). Em diversas áreas da engenharia, recorrem-se com frequência a técnicas de análise numérica quando os problemas matemáticos enfrentados exigem um tratamento analítico complexo, ou quando não permitem um tratamento puramente analítico. De fato, nos anos recentes, nenhuma área da matemática cresceu mais em importância do que a análise numérica. À medida que os computadores são aperfeiçoados, essa importância aumenta, e aumenta também a rapidez com que a própria análise numérica se desenvolve (BARBOSA *et al*, 2006).

A aplicação de métodos numéricos, em problemas de engenharia, é uma operação matemática base e indispensável nas ciências exatas. Sendo que, o cálculo de raízes e pontos ótimos são apenas algumas de suas inúmeras aplicações. É certo que a resolução de funções simples pode ser realizada de forma analítica, entretanto muitas funções e problemas matemáticos relevantes à engenharia são difíceis ou até impossíveis de obter soluções analíticas.

Após a criação de uma ferramenta de programação, no sentido de facilitar o contato do usuário com a mesma, a elaboração de uma interface homem-máquina é de fundamental importância. Tal interface funciona como um canal de comunicação, permitindo assim uma melhor visualização do processo. Uma vez que os ambientes de interface gráfica de processos são cada vez mais utilizados no setor industrial e acadêmico, o monitoramento das variáveis deve ser realizado pensando-se na facilidade na interpretação de resultados, no treinamento de operadores e outras aplicações.

Desse modo, este projeto tem por objetivo a utilização de métodos numéricos programados, e a partir destes, desenvolver telas supervisórias práticas ao usuário que facilitarão a visualização e manuseio. Tais ferramentas poderão ser utilizadas por qualquer usuário, mesmo que ainda não possua conhecimento avançado dos métodos aplicados e de programação.

2 METODOLOGIA

O desenvolvimento da ferramenta deve ser implementado em uma plataforma robusta e que possa ser estruturada para o desenvolvimento dos métodos númericos. A plataforma MATLAB® – GUIDE permite o desenvolvimento estruturado de tais método, os quais podem ser facilmente conectados a ferramentas gráficas. Dessa forma, o ambiente interativo deve ser pensado de acordo com o objetivo final, tendo em vista que haverá a necessidade de interação direta com o usuário. Tais requisitos são encontrados no pacote de programação gráfica do MatLab, o qual destaca-se pela rapidez em resposta e a praticidade.

A *toolbox* denominada por GUIDE (*Graphical User Interface Design Environment*) possibilita o desenvolvimento das interfaces. O funcionamento básico é feito através de *call-backs* automatizados para eventos programados entre a GUI (*Graphical User Interface*) e os arquivos de programação utilizados no desenvolvimento dos aplicativos, este modo de programação é dito orientado a objetos.

2.1 Metodologia Geral

O aplicativo segue a seguinte lógica de programação:

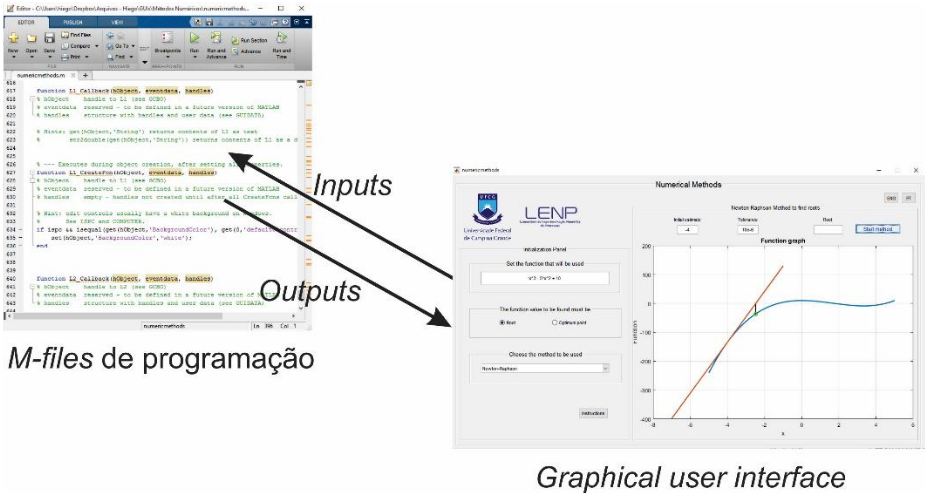
1. Na base estão os *m-files* de programação. Esses arquivos são programados convencionalmente através de *functions* que resolvem as equações implementadas pelo usuário, capazes de resolver os métodos numéricos em *loop* e retornar o valor de cada ponto encontrado no método;

2. Todas as alterações feitas pelos usuários em formas de *strings* são convertidas para *inputs* de precisão dupla pelos códigos, os quais são repassados à camada primária, os *m-files* do núcleo;

3. A conexão entre os usuários e as modificações no processo depende da terceira camada, a qual é definida como a própria interface gráfica do usuário. Tais informações interagem com os arquivos dos métodos, que calculam a saída necessária e enviam os resultados de volta para o GUI, dando instantaneamente a resposta gráfica na tela para o usuário.

Na Figura 1 está apresentado o fluxograma da estrutura de programação para as aplicações relatadas anteriormente e comunicação entre as etapas.

Figura 1 – Esquema da programação implementada no aplicativo.



Fonte: Própio Autor

2.2 Aplicativo: Métodos Numéricos

O Cálculo Numérico engloba um conjunto de métodos analíticos ou computacionais para a resolução de modelos matemáticos de forma aproximada. Tais métodos são aplicados a problemas complexos que não apresentam solução exata. Portanto, o Cálculo Numérico é de fundamental importância para a engenharia, tendo em vista que a maioria dos modelos implementados em processos químicos apresentam alto grau de não linearidade.

As técnicas gráficas têm valor prático limitado pois não são precisas. Entretanto, métodos gráficos podem ser usados para obter estimativas iniciais das raízes. As quais são usadas como aproximações iniciais para os métodos numéricos (CHAPRA e CANALE, 2011). O módulo desenvolvido proporciona a visualização gráfica das funções inplementadas, permitindo que o usuário faça análisa da função e escolha a(s) estimativa(s) inicial(is) necessária(s) para o método aplicado.

2.2.1 Métodos para determinação de raízes

Para equações mais simples, soluções analíticas diretas e simples permitem encontrar as raízes em função dos coeficientes. No entanto, no caso de funções mais complexas, é praticamente impossível determinar analiticamente as raízes. Diante dessa limitação, encontramos soluções aproximadas, não sendo uma limitação séria, pois, com os métodos aplicados é possível encontrar os zeros de uma função com uma precisão prefixada. Alguns métodos para tal finalidade foram implementados e a base teórica apresentada a seguir:

2.2.1.1 Método de Newton-Raphson

O método de Newton-Raphson é um método aberto, muito utilizado na determinação de raízes de funções. Graficamente, o método de Newton-Raphson obtém tangentes (derivada da função) à curva na estimativa inicial e tomando a próxima aproximação dada pela interseção da reta tangente com o eixo das abcissas.

O método é implementado em iterações, sendo representado matematicamente da seguinte forma:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \tag{1}$$

2.2.1.2 Método da Secante

O método da Secante, contorna de certa forma a dificuldade do método de Newton-Raphson, substituindo a derivada da função por uma aproximação. Portanto, são necessárias duas aproximações iniciais, as quais formarão uma reta secante à função. Nesse caso, obtém-se a interseção com o eixo x, sendo a próxima estimativa o ponto obtido. Repetindo o processo até obter a precisão estabelecida.

O método é representado matematicamente da seguinte maneira:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n) \tag{2}$$

2.2.1.3 Método da Bisseção

O método da bisseção é um método intervalar, necessitando de dois limites iniciais. O método consiste em dividir o intervalo ao meio e verificar em qual a raiz está contida, tomando este como o novo intervalo a ser bisseccionado.

A equação que descreve o método é simples e intuitiva:

$$x_m = \frac{x_{lower} + x_{upper}}{2} \quad (3)$$

Para verificar o novo intervalo que contém a raiz, utiliza-se o teorema de Bolzano.

Se $f(x_m) \cdot f(x_{lower}) > 0$, o novo intervalo será (x_m, x_{upper}) caso contrário, será (x_{lower}, x_m).

2.2.2 Métodos para otimização

Os modelos utilizados possuem essencialmente característica descritiva, isto é, foram desenvolvidos para simular o comportamento de um artefato de engenharia ou sistema. Em contraste, a otimização tipicamente lida com a busca pelo “melhor resultado”, ou com a solução ótima de um problema. Portanto, no contexto da modelagem, eles são denominados modelos prescritivos, uma vez que podem ser utilizados para prescrever uma linha de ação ou o melhor projeto (CHAPRA e CANALE, 2011).

De acordo com Martínez e Santos (1998), um algoritmo básico de otimização irrestrita consiste em, a partir de cada ponto obtido, determinar uma direção para dar o próximo passo. Como o objetivo é otimizar a função implementada, é razoável que o método encontre pontos críticos, cabendo ao usuário a análise e classificação do ponto, como sendo de mínimo, ou inflexão.

2.2.2.1 Método de Newton-Raphson

Diversos métodos de otimização podem ser obtidos derivando a função que representa a rotina de obtenção de raízes. Isto é aplicado ao método de Newton, no qual, para obter o ponto crítico é necessário minimizar o valor da primeira derivada da função. A cada interação obtém-se tangentes à curva no ponto anterior, obtendo-se assim, a próxima aproximação dada pela interseção da reta tangente com o eixo das abcissas.

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)} \quad (4)$$

2.2.2.2 Método de Interpolação quadrática

Assim como apenas uma reta ultrapassa dois pontos, há apenas uma parábola passando por três pontos. Portanto, o ponto crítico será encontrado quando a derivada da função quadrática for zero. Para o método serão necessárias três estimativas iniciais, encontrando um novo valor para o ponto ótimo através da Equação 5.

$$x_3 = \frac{1}{2}\frac{f(x_0)({x_1}^2 - {x_2}^2) + f(x_1)({x_2}^2 - {x_0}^2) + f(x_2)({x_0}^2 - {x_1}^2)}{f(x_0)(x_1 - x_2) + f(x_1)(x_2 - x_0) + f(x_2)(x_0 - x_1)} \tag{5}$$

Para descartar um ponto, se $f(x_0) > f(x_2)$, x_3 será igual a x_0, caso contrário x_3 será igual a x_2, diminuindo assim o intervalo até se aproximar do ponto ótimo.

2.2.2.3 Método da Seção Áurea

Similar ao método da bisseção, este método necessita de um intervalo inicial contendo um ponto ótimo. Porém, é necessário mais dois pontos, um para definir a nova secção criada e outro para analisar qual dos dois intervalos contém o ponto ótimo. Estes dois últimos são encontrados a partir da seção áurea.

O método consiste em utilizar a razão áurea:

$$d = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(x_{upper} - x_{lower}) \tag{5}$$

E assim calcular os dois novos pontos necessários para o método:

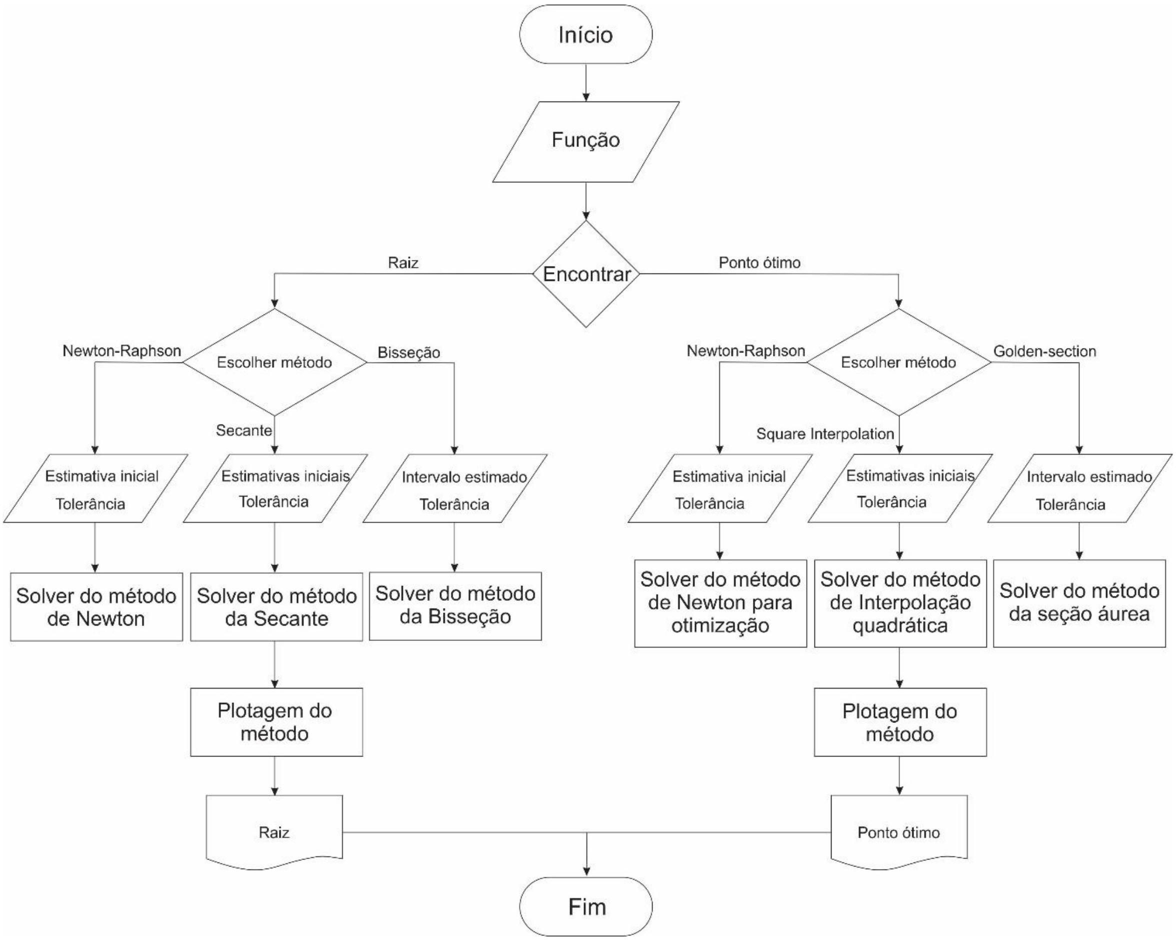
$$x_1 = x_{lower} + d \tag{6}$$

$$x_2 = x_{upper} - d \tag{7}$$

Se $f(x_1) > f(x_2)$, x_{upper} será igual a x_2, caso contrário x_{lower} será igual a x_1, diminuindo assim o intervalo até se aproximar do ponto ótimo.

O fluxograma abaixo apresenta o procedimento de resolução utilizado pelo aplicativo:

Figura 2 – Fluxograma para escolha do método numérico desejado e obtenção de resultados.



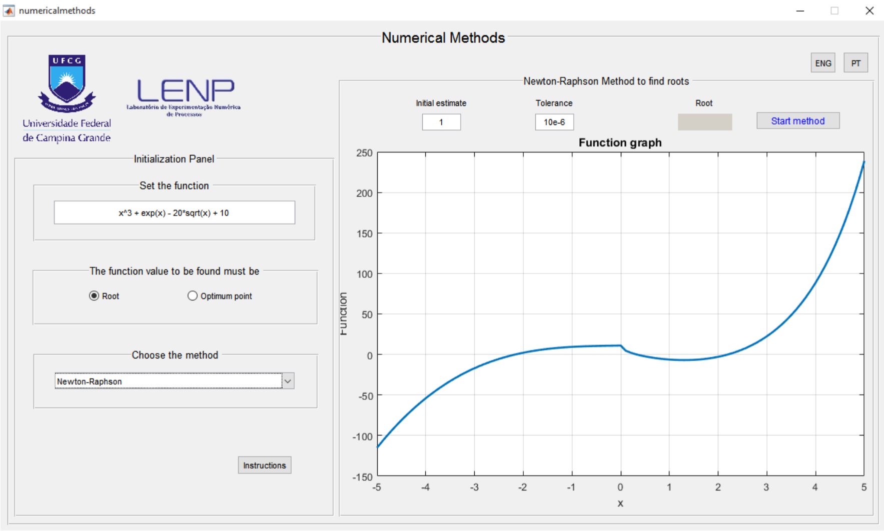
Fonte: Própio Autor

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O módulo desenvolvido possibilita o contato direto do estudante de engenharia com os principais métodos numéricos, dinamizando o aprendizado na disciplina. Isto é possível com a interatividade proporcionada pelo aplicativo, de modo que, a cada opção gráfica mostrada na interface gráfica, cabe ao usuário analisar qual o melhor método utilizado, assim como suas estimativas iniciais.

A interface homem-máquina, apresentada na Figura 3, proporciona ao módulo simplicidade e possibilita a fácil utilização. Deste modo, o usuário visualiza apenas a interface criada, possibilitando a utilização da ferramenta, mesmo que, não possua um conhecimento avançado em programação.

Figura 3 – Interface criada para o módulo.

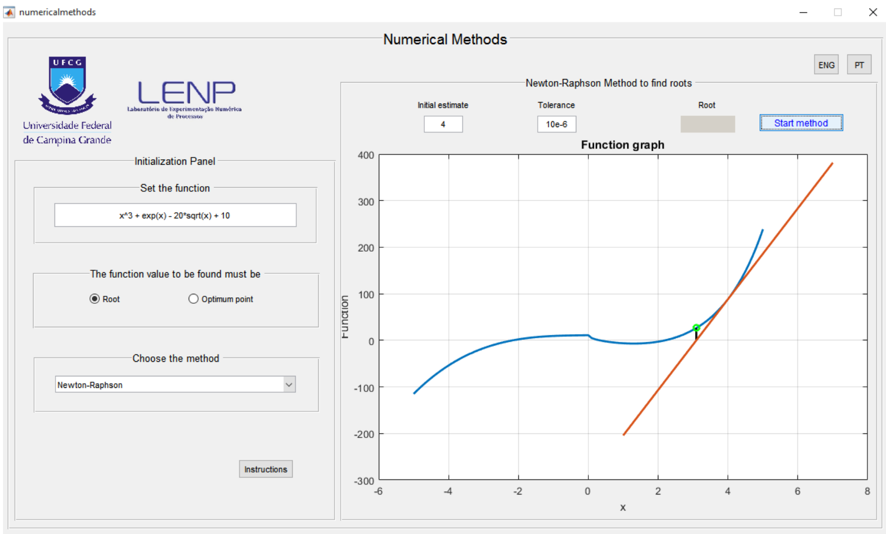


Após inserção da função analisada, a mesma é gerada graficamente, permitindo a visualização de raízes e pontos ótimos. Nesse ponto, tem-se a opção para escolha da funcionalidade da ferramenta (determinação de raízes ou ponto ótimo), bem como o método que será utilizado. De acordo com cada metodologia escolhida, Equações 1 a 7, caixas de texto específicas serão apresentadas. Para exemplificar, a função abaixo foi utilizada, Equação 8.

$$f(x) = x^3 + e^x - 20\sqrt{x} \qquad (8)$$

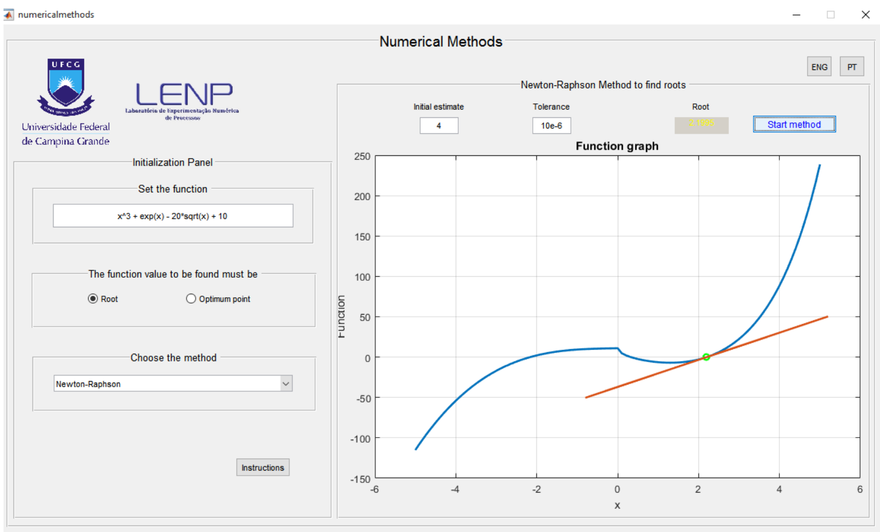
Observa-se graficamente três raízes reais, e utilizando o método de Newton-Raphson, foi utilizada como estimativa inicial $x = 4$, iniciando a resolução do problema (*Start method*).

Figura 4 – Visualização gráfica do método de Newton-Raphson.



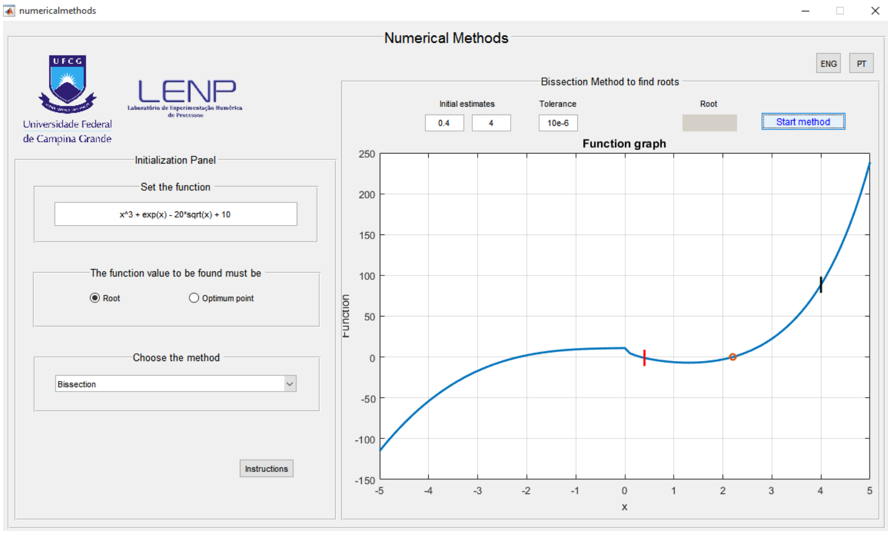
Após seis interações, uma das raízes da função foi encontrada ($x = 2{,}1995$), com este valor sendo mostrado na GUI através de um *display* (*Root*), Figura 5.

Figura 5 – Valor da raiz sendo mostrado na interface.



Para comparação, a mesma função, Eq. 8, utilizada com estimativas iniciais $x_1 = 0{,}4$ *e* $x_2 = 4$ para o método da bissecção.

Figura 6 – Visualização gráfica do método da Bisseção.



A mesma raiz ($x = 2{,}1995$) pode ser encontrada após 21 interações. Conclui-se que para as estimativas iniciais adotadas, e mesma tolerância ($tol = 10^{-6}$), o método de Newton-Raphson apresenta uma melhor convergência.

4 CONCLUSÃO

O módulo desenvolvido apresenta-se como uma ferramenta de fácil utilização, o qual promove a análise e interpretação da disciplina estudada. A ferramenta demonstra conceitos básicos do cálculo numérico de forma simplificada e intuitiva. Os métodos numéricos aplicados também apresentam grandes utilizações na vida acadêmica, possibilitando o preparo do aluno para resolução de diversos problemas propostos ao longo das disciplinas.

Os resultados obtidos demonstram, de forma gráfica, todos os métodos implementados no módulo, permitindo que o usuário analise os resultados obtidos, bem como a funcionalidade dos métodos. Deste modo, o usuário pode avaliar qual método tem maior grau de convergência e assim, maior eficiência. Salienta-se que a utilização do aplicativo em sala de aula deve auxiliar o processo de ensino-aprendizagem. O mesmo pode ser utilizado por usuários com pouco conhecimento em programação, de forma a complementar os conhecimentos adquiridos na disciplina de métodos numéricos para engenharia.

5 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BARBOSA, A. C.; CARVALHARES, C. G.; COSTA, M. V. A computação numérica como ferramenta para o professor de Física do Ensino Médio**. Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 28, n. 2, p. 249 - 254, 2006.

BELHOT, R. V.; FIGUEIREDO, R. S.; MALAVÉ, C. O. **O Uso da Simulação no Ensino de Engenharia**. Anais COBENGE 2001– CD-ROM - XXIX Congresso Brasileiro de Ensino de Engenharia. Porto Alegre: UFRGS, 2001.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Métodos Numéricos para Engenharia.** 5ª Edição, AMGH Editora, 2011.

MARTINEZ, J. M.; SANTOS, S. A. **Métodos computacionais de otimização**. [S.l.]: Departamento de Matemática Aplicada, IMECC - UNICAMP, 1998.