Exercícios 3

Prazo para entrega: segunda-feira 23/09 até as 23:59h.
Enviar relatório em formato PDF para bernardomartinsrocha@gmail.com

Problema 1

A equação de estado de *van der Waals*,

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = RT, \tag{1}$$

relaciona a pressão p, o volume v e a temperatura T de um gás, onde R é uma constante universal e a e b são constantes que dependem de um gás particular. Utilizando unidades apropriadas, $R = 0.082054$ e, em particular, para o dióxido de carbono $a = 3.592$ e $b = 0.04267$.

(a) Utilize um método para encontrar raízes de equações para calcular o volume v para uma temperatura de 300 K e para as pressões de 1 atm, 10 atm e 100 atm. Apresente em detalhes o método escolhido e os seus parâmetros, tais como critério de convergência, número de iterações realizadas, etc.

(b) Compare seus resultados com a equação de um gás ideal: $pv = RT$.

(c) Utilize agora equação do gás ideal para fornecer uma aproximação inicial v_0. Compare a convergência do método utilizando uma outra aproximação inicial qualquer, como por exemplo $v_0 = 0$ ou $v_0 = 1$.

Problema 2

Considere o problema de encontrar a menor raiz positiva da seguinte equação não-linear:

$$f(x) = \cos(x) + \frac{1}{1 + e^{-2x}} = 0. \tag{2}$$

Utilizando apenas o método do ponto fixo investigue de forma teórica (faça as contas!) e empírica (realize experimentos!) os seguintes esquemas iterativos para resolver esse problema usando uma aproximação inicial $x_0 = 3$. Para cada esquema abaixo, você deve mostrar que se trata de um problema de ponto fixo e, ainda, mostrar se o esquema é convergente ou não. Realize experimentos computacionais e que comprovem sua análise.

(a) $x_{k+1} = \arccos\left(-1/(1 + e^{-2x_k})\right)$.

(b) $x_{k+1} = 0.5 \log\left(-1/(1 + 1/cos(x_k))\right)$.

(c) Método de Newton.

Problema 3

Os polinômios de Chebyshev são importantes em diversas aplicações (iremos estudar algumas adiante no curso!). Eles podem ser definidos através da seguinte relação de recorrência:

$$T_0(x) = 1 \tag{3}$$
$$T_1(x) = x \tag{4}$$
$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \tag{5}$$

Os 4 primeiros polinômios de graus 1,2,3 e 4, respectivamente, são dados por:

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_2(x) &= 2x^2 - 1 \\ T_3(x) &= 4x^3 - 3x \\ T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1, \end{aligned}$$

e os demais podem ser obtidos usando a equação (5).

Considerando que as raízes desses polinômios estão localizadas no intervalo $[-1, 1]$, escreva um programa que obtenha aproximações para todas as raízes de cada polinômio até o polinômio de grau 6. Seu programa pode utilizar qualquer método numérico para encontrar raízes de equações.

(a) Apresente em detalhes o método escolhido e os seus parâmetros, tais como critério de convergência, aproximação inicial utilizada, etc.

(b) As raízes do polinômio de grau n são dadas pela seguintes expressão:

$$x_k = \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right), \quad k = 1, \ldots, n \tag{6}$$

Para cada caso (grau do polinômio n) faça um gráfico e apresente o polinômio e suas raízes dadas pela equação (6).

(c) Compare as suas aproximações para as raízes em cada caso com os valores das raízes dados pela equação (6).

Problema 4

Desafio! Considere o seguinte polinômio, conhecido como polinômio de Wilkinson:

$$p(x) = (x-1)(x-2)(x-3)\ldots(x-18)(x-19)(x-20) \tag{7}$$

cujas raízes são os inteiros $x_k = 1, 2, \ldots, 19, 20$. O polinômio pode ser escrito em termos dos monômios da seguinte forma

$$\begin{aligned} p(x) = {} & x^{20} - 210x^{19} + 20615x^{18} - 1256850x^{17} + 53327946x^{16} - 1672280820x^{15} \\ & + 40171771630x^{14} - 756111184500x^{13} + 11310276995381x^{12} - 135585182899530x^{11} \\ & + (1.3075350105404 \times 10^{15})x^{10} - (1.01422998655115 \times 10^{16})x^{9} \\ & + (6.30308120992949 \times 10^{16})x^{8} - (3.11333643161391 \times 10^{17})x^{7} \\ & + (1.20664780378037 \times 10^{18})x^{6} - (3.59997951794761 \times 10^{18})x^{5} \\ & + (8.03781182264505 \times 10^{18})x^{4} - (1.2870931245151 \times 10^{19})x^{3} \\ & + (1.38037597536407 \times 10^{19})x^{2} - (8.7529480367616 \times 10^{18})x \\ & + (2.43290200817664 \times 10^{18}) \end{aligned} \tag{8}$$

Sendo assim

(a) Utilizando qualquer método à sua escolha, tente obter da forma mais precisa possível a raiz $x = 15$. Apresente ao menos 3 tentativas de aproximações desta raiz utilizando o polinômio dado na forma da equação (8). Apresente todos os detalhes relevantes de cada tentativa: método, número de iterações, critério de parada (tolerância), aproximação inicial ou intervalo inicial, etc. Você pode tentar combinar métodos para obter suas aproximação (ex: bisseção + Newton/secante).

(b) Realize os mesmos experimentos com o polinômio na forma da equação (7).

(c) Apresente uma discussão dos seus resultados nos itens (a) e (b).

Referências

- As atividades 1 e 2 são atividades de programação do livro "*Scientific Computing: An Introductory Survey*" do Michael T. Heath, segunda edição, Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Mais detalhes sobre o polinômio de Wilkinson podem ser encontrados no seguinte link: https://en.wikipedia.org/wiki/Wilkinson%27s_polynomial.