Relatório do Projeto 1 de Cálculo Numérico

Erick Kussumoto do Nascimento - 196492
Gabriel Volpato Giliotti - 197569

Problema:

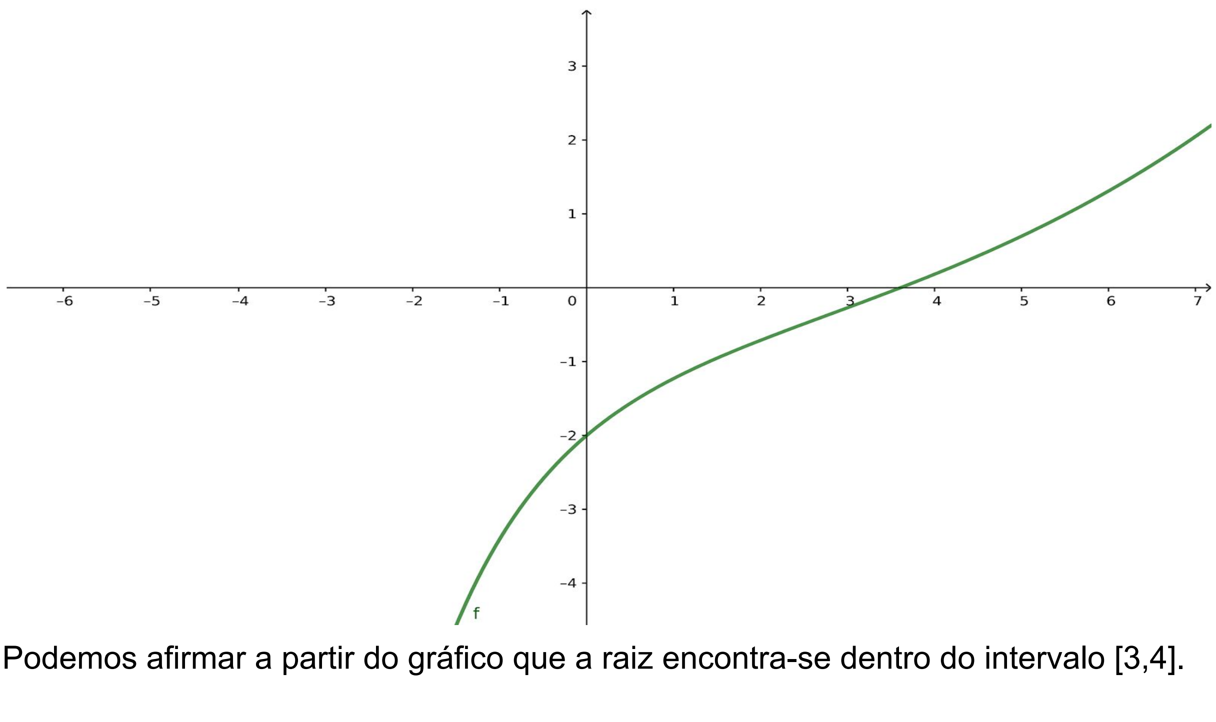
A equação de Butler-Volmer em processos eletroquímicos relaciona a densidade de corrente com o potencial em um eletrodo e pode ser escrita como:

$$f(x) = e^{\alpha x} - e^{(\alpha - 1)x} - \beta$$

Considere α = 0.2 e β = 2 e determine o potencial que anula a densidade de corrente, isto é, encontre x tal que f (x) = 0.

Introdução:

Inicialmente, neste projeto, realizamos uma primeira análise utilizando a ferramenta Geogebra online, gerando um gráfico onde podemos identificar (visualmente) um possível intervalo para o qual podemos encontrar uma raiz da equação dada no problema. O gráfico a seguir é dado pela própria aplicação Geogebra online:



Podemos afirmar a partir do gráfico que a raiz encontra-se dentro do intervalo [3,4].

No projeto utilizamos a linguagem de programação python para desenvolver as devidas soluções para o problema.

a) Para encontrar o intervalo no método da bissecção implementamos uma lógica que espera dois valores x1 e x2 e com eles será exibido se há uma raíz da função ou não seguindo o Teorema de Bolzano. Nele é descrito que, se f(a)*f(b) < 0, existe pelo menos uma raíz com valor igual a Ɛ(x = Ɛ) entre o intervalo [a,b]. No código, calculamos o valor da função para ambas as variáveis e implementamos uma condicional que verifica se o teorema é respeitado e plota um gráfico formado do intervalo respondendo se há ou não raízes nele. A biblioteca que utilizamos para gerar o gráfico foi a matplotlib.pyplot.

b) Para o item b), tivemos que implementar as fórmulas para cada método e, para isso, criamos uma função para cada uma que é chamada no escopo da função.

Algoritmo da Bissecção:

- O método da bissecção, no código, tem como entrada um intervalo fechado entre x_1 e x_2, uma tolerância e um número de iterações máxima que o método pode realizar.
- Em seguida, para esse intervalo, fazemos uma verificação calculando o valor das função nos pontos de extremo do intervalo.
- O Teorema de Bolzano é a verificação da troca de sinal no intervalo onde, se f(x_1)*f(x_2) é menor que zero, então existe uma raiz no intervalo. Caso contrário, não existe raiz.
- Em seguida , calculamos o ponto médio entre x_1 e x_2 e iniciamos o loop até o numero maximo de iteracoes dado como parâmetro. Tomando então o valor da função no ponto médio, se f(pmedio) for igual a zero ou o for menor que a tolerância dada, então retornamos o valor, caso contrário, faremos uma nova verificação entre f(x_1) e f(*pmedio*) como foi feito anteriormente com teorema de Bolzano.
- Assim , se f(x_1)*f(*pmedio*) for menor que zero, a raiz se encontra nesse intervalo, caso contrário, a raiz está entre f(pmedio) e f(x_2). Em seguida, após as verificações o método atribui .
- Finalmente, tal procedimento segue até convergir para a raiz ou se aproximar dela.
- Além disso, para estimar um número de iterações máxima para o método da bissecção, fazemos uso da seguinte função:

$$k = (log(e^{(x2-x1)}) - log(e^{tolerância}))/ log(e^{2})$$

- Tal função estima o número de iterações máxima para o algoritmo levando em conta os primeiros números passados na entrada como o intervalo. Tal função se pode deduzir a partir de uma fórmula de recorrência quando realizamos os cálculos dos pontos médios para cada iteração do método. Isso, no final, pode afetar os resultados pois se um intervalo for muito pequeno, isto é, já muito próximo de uma raiz como casa decimais ,o número de iterações pode impedir com que o resultado se aproxime da raiz de forma mais precisa.

Algoritmo de Newton-Raphson:

- Para o método de Newton, o cálculo segue a ideia do Método do Ponto Fixo, que espera encontrar uma função de iteração que se aproxime da raiz da função em que estamos trabalhando. Para encontrá-la de maneira mais rápida, o Método de Newton sugere aplicarmos uma função de iteração tal que $g'(p) = 0$, sendo *p* o ponto fixo da função e sendo $g'(x)$ a derivada da função inicial g.
- De forma mais simples podemos implementar a seguinte função no código que itera no máximo k vezes até chegar às raízes:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

- Diferente do método da bissecção, os critérios de parada das iterações dependem de uma aproximação inicial x_0 da raiz que é dada de forma arbitrária pelo usuário. Os critérios de parada verificam se $f(x_0) \leq \varepsilon$ e se $|x_k - x_{k-1}| \leq \varepsilon$. Adicionamos também um número máximo de iterações como critério de parada de forma a evitar que o algoritmo execute um número exagerados de vezes.

- Notamos que o Método de Newton executa de forma mais rápida do que o da Bissecção e também é mais preciso, já que dependemos de somente um valor aproximado inicial ao invés de um intervalo inteiro e que, quanto mais próximo da raiz, mais irá convergir para seu valor exato.

c) Para formatar a tabela, exibimos os valores do intervalo (para o método da bissecção) ou o valor de aproximação inicial (Newton), a raiz encontrada e o número de iterações realizadas pelo algoritmo. O resultado a seguir ilustra valores importantes de diferentes entradas para que possamos tirar conclusões:

Método da Bissecção (com erro de 0,0000001 ou no máximo 20 iterações):

x_1	x_2	raiz para f(x)	nº de iterações
-50	50	3.6036968	20
-10	10	3.6037350	20
-5	5	3.6037302	20
0	5	3,6037302	20
3	4	3,6037331	18

Método de Newton-Raphson (com erro de 0,0000001 ou no máximo 20 iterações):

x_0	x	nº de iterações
50	3.6037324498788457	13
10	3.6037324492147604	5
5	3.6037325119846373	3
0	3.6037324507520503	4
3	3.60373854791649	2

Conclusão:

- Pelas tabelas obtidas no item c), podemos afirmar que o Método de Newton-Raphson se mostra mais eficiente e mais rápido do que o da Bissecção já que possui um menor número de iterações necessárias para se aproximar das raízes de funções, mas em contrapartida tem custo computacional elevado devido ao cálculo da derivada enquanto que a Bisseção apenas utiliza a função dada e um cálculo para o ponto médio do intervalo.

- Além disso, o método de Newton-Raphson tem maior precisão em comparação com o método da Bissecção em determinadas situações, como por exemplo, enquanto o método de Newton-Raphson converge sem a necessidade de se estipular um intervalo, a Bisseção , fazendo uso de uma função que estipula o número de iterações máxima através dos extremos do intervalo, pode ter sua precisão reduzida devido ao tamanho do intervalo passado

- No final cada modelo seguiu o proposto e foi capaz de encontrar a raiz de forma bem aproximada utilizando seu método. A grande diferença se encontra no número de iterações e na precisão das casas decimais dos dados obtidos, sendo o Método de Newton-Raphson o método de convergência mais eficiente.

Referências:

[1]Cálculo Numérico - Aspectos Teóricos e Computacionais - 2a Edição
[2]http://www.decom.ufop.br/bcc760/material_de_apoio/notas_de_aulas/notas_raizes.pdf
[3]https://www.geogebra.org/m/KGWhcAqc (Para grafico)