5ª Aula Laboratorial de Matemática Computacional
Licenciatura em Matemática Aplicada e Computação
2º Sem. 20/21

Problemas

1. Construa uma função em MATLAB para aplicar o método da secante. Os dados de entrada devem ser uma função f, duas aproximações iniciais x_0,x_1, e uma tolerância ϵ. Os dados de saída devem ser a aproximação x da raiz de f e o número de iterações. Sugestão: utilize como modelo a função 'Newton'. A fórmula iteradora do método da secante é

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

2. Chama-se método quasi-Newton uma variante do método de Newton em que, em vez da derivada $f'(x)$, se usa uma aproximação, dada por

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\delta) - f(x)}{\delta},$$

onde δ é um valor dado (δ deverá ser não nulo, mas próximo de 0).

(a) Seja z uma raiz de f e $[a, b]$ um intervalo tal que $z \in [a, b]$. Admitindo que f é uma função que tem duas derivadas contínuas em $[a, b]$, $f'(z) \neq 0$ em $[a, b]$, determine o coeficiente assimptótico de convergência do método de quasi-Newton, em função de δ. Poderá nalgum caso o método de quasi-Newton ter convergência supralinear? Justifique.

(b) Implemente em MATLAB o método de quasi-Newton, através de um código análogo ao do método da secante. Tenha em conta que neste caso o valor de δ é um dos dados de entrada do programa.

3. A equação de estado de um gás tem a forma

$$(p + a(N/V)^2)(V - Nb) = kNT,$$

onde p e T são, respectivamente a pressão e a temperatura do gás; a e b são dois coeficientes que dependem do gás considerado, N é o número de moléculas contidas no volume V e k é a constante de Boltzmann.

Sabendo que para o dióxido de carbono os coeficientes a e b são $a = 0.401$ e $b = 42.7 \times 10^{-6}$ (em unidades do sistema internacional),pretende-se determinar, com precisão $\epsilon = 10^{-12}$, o volume ocupado por 1000 moléculas do mesmo gás à temperatura de $T = 300K$ e pressão $p = 3.5 \times 10^7$. O valor da constante de Boltzmann é $k = 1.3806503 \times 10^{-23}$.

(a) Com o auxílio de um gráfico, determine um intervalo que contenha a raiz procurada da equação; justifique teroricamente que nesse intervalo a equação tem uma única raiz.

(b) Resolva o problema usando o método de Newton;

(c) Resolva o problema usando o método da secante;

(d) Resolva o problema utilizando o método quasi-Newton (determine experimentalmente o valor de δ que proporciona a convergência mais rápida.)

(e) Com base nos resultados obtidos, compare os três métodos quanto à eficiência.