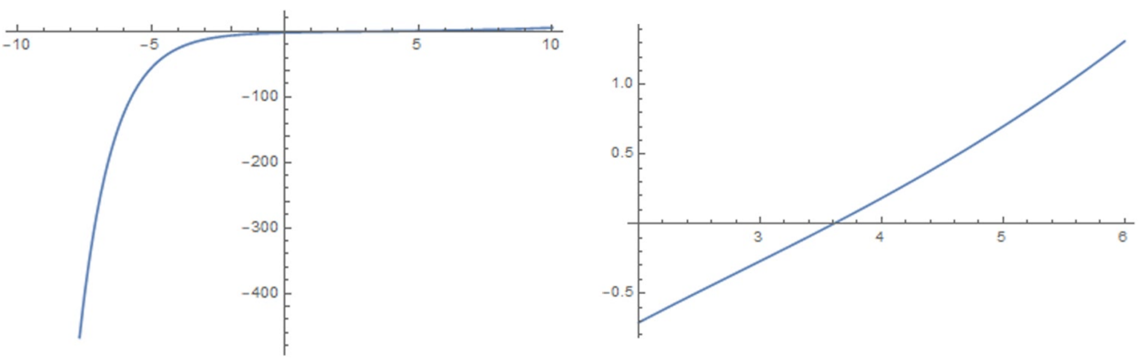
MS211 - Cálculo Numérico
Turma K - Prof João Batista Florindo

Projeto 1

Gabriel Borin Macedo 197201
Leonardo Drago 201150

Foi encontrado o intervalo que contém a raiz de $f(x) = e^{0.2\,x} - e^{-0.8\,x} - 2$ utilizando o software Wolfram Mathematica, obtendo o valor da raiz sendo r = 3.60373 [*última versão 11.3.0 - 8 de março de 2018*], plotando assim, dois gráficos, o primeiro com um intervalo de x consideravelmente amplo para podermos identificar os valores de x que satisfazem $f(x) = 0$.

(I) (II)



$Gráfico\ de\ f(x) = e^{0.2\cdot x} - e^{-0.8\cdot x} - 2.\ Com\ intervalos\ de\ x\ em\ (I)\ de\ [-10;\ 10]\ e\ em\ (II)\ de\ [2;\ 6]$

Após feito os gráficos, identificarmos que o intervalo está próximo de 3.4 e 3.8, intervalo este que será levado em conta posteriormente para identificarmos se os métodos têm convergência para a solução de $f(x) = 0$ com o auxílio de programas elaborados na linguagem Python [*última versão 3.7.0 - 27 de junho de 2018*].

Descrição do algoritmo

Neste projeto, utilizamos dois algoritmos para o cálculo da raiz aproximada da equação, os quais utilizamos o método de Newton e da Bissecção, onde iremos descrever suas vantagens e desvantagens, para o cálculo da raiz aproximada da equação de Butler-Volmer.

Método da Bissecção

O método da Bissecção é um método numérico no qual, dado um valor de xo dentro de um intervalo numérico I = [a, b], onde se [f(a), f(b)] existir em I, com f(a)*f(b) < 0 e

$\frac{\partial f}{\partial x}$ (x) > 0.

Caso essas condições sejam garantidas, temos, por via teorema, que o método irá convergir para uma raiz, e neste caso, será única.

A idéia deste algoritmo é reduzir o intervalo que contém a raiz pela metade em cada interação da seguinte forma : após de fazermos a média do intervalo, iremos ver se f(b) e f(a) possui sinal oposto de f(x) obtido na interação, para que assim, criarmos um novo intervalo menor que seus extremos serão o novo valor de x e o valor desejado, fazendo que assim a raiz esteja neste novo intervalo e consequentemente estaremos nos aproximando dela em cada interação.

Para melhor esclarecimento, pegue o exemplo no qual f(x) > 0, f(b) < 0 e f(a) > 0. Então, o novo intervalo será o valor que é oposto ao de f(x), ou seja, I = [x, b], pois sabemos que a raiz pertence a este intervalo.

Além disso, é necessário que este algoritmo siga o seguinte critério de parada : caso este atinja o número máximo de interações e que f(x) $\geq$ ϵ ou que ∣ b - a ∣ $\geq$ ϵ, onde ϵ refere-se ao erro da máquina ou da precisão do computador. Assim, fazemos essa comparação dos erros para cada novo intervalo [a, b] adotado.

A vantagem deste método é que não há exigências sobre o comportamento de continuidade da função f(x) neste intervalo para que este método funcione.

Seu ponto negativo é de sua convergência, uma vez que f (x) não decresce de forma monótona. Isto ocorre pois devido a forma de interação :

$$x = \frac{b+a}{2}$$

Como este algoritmo não leva em consideração o valor de f(x) neste intervalo, este levará mais interações para que a mesma convirja para o valor da raiz.

Com base no intervalo obtido no início deste projeto, foi elaborado uma tabela com valores de intervalo onde se possui o valor de solução de $f(x)=0$. Nela, analisaremos se o processo converge, e também o custo computacional do método.

Tabela 1 - Método da Bissecção com erro de 0.0001 ou 20 iterações			
a	b	$\bar{x}$	iterações
-10	10	3.6037445068359375	18
0	6	3.603790283203125	16
1	8	3.6036911010742188	17
3.4	3.8	3.6038085937499997	12
3	4	3.60369873046875	14
3.5999	3.7234	3.6036990722656252	11
2.75	6.99	3.603680419921875	16
3.521	3.700	3.6037700195312503	11
0.76	16.00	3.6037217712402345	18
-3.7	3.7	3.603739929199219	17

Para o caso em que fizemos a coleta de 10 dados, os valores das raízes aproximadas aproximam-se do valor esperado da raiz, que iremos denotar por r, é equivalente a r = 3.60373 .

Para estes casos, nossos valores obtidos, conseguimos a precisão de 3 casas decimais de precisão em comparação com o valor da raiz ϵ.

Entretanto, apesar de haver convergência em todos os casos obtidos, o número de iterações necessárias para a obtenção do valor de $\bar{x}$ são muito elevados, até mesmo num caso onde os intervalos estão próximos da solução e, para intervalos maiores que contêm a raiz, o número de iterações quase atinge o valor do critério de parada. Para algum processo onde se têm um longo intervalo, este método não seria tão recomendado pois, como dito anteriormente, haveria um número muito grande de iterações, o que geraria um custo computacional grande.

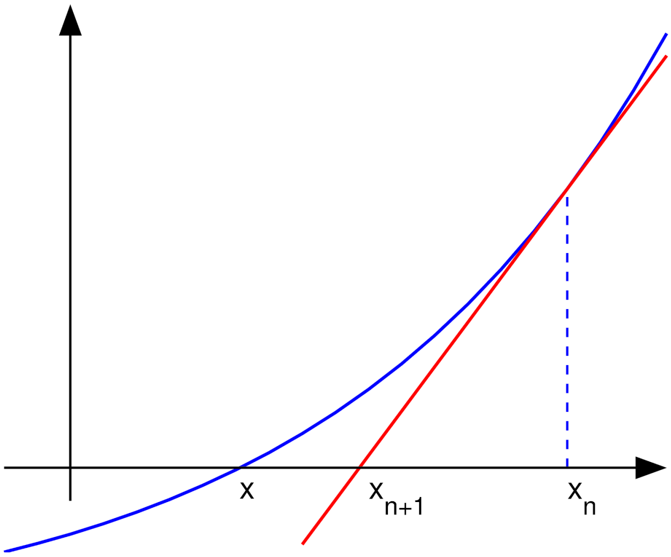
Método de Newton

Já o método de Newton é um método numérico que deve satisfazer algumas das seguintes características : dado um valor de xo dentro de um intervalo discreto I = [a, b], com f(x) contínua em I, f(a)*f(b) < 0, ou seja, f(a) e f(b) possuem sinais opostos, possui uma única raiz ϵ ∊ I e que f'(x) f''(x) são diferentes de zero ao longo deste intervalo, em outras palavras, significa que elas não se anulam para qualquer valor em I.

Dessa forma, por via teorema, se f(a) * f(b) < 0 com f'(x) e f''(x) diferentes de zero e preservarem seus sinais ao longo de I. Então, podemos adotar um valor inicial x_0 ∈ I tal que
f''(x_0) * f(x_0) > 0.

Então, temos a garantia que podemos gerar em k - passos, uma sequência de valores de X_K que convirja para o valor da raiz є na qual, f(X_K) = 0.

Onde, para cada interação X_K ,iremos determinar pelo valor da tangente dos valores de cada interação, como demonstrado no gráfico abaixo :



:

Assim, teremos que, para cada passo, podemos definir a interação da seguinte forma :

$$tan(X_K) = \frac{f(X_{K-1})}{X_K - x_{k-1}} = f'(X_{K-1}) .$$

Dessa forma, cada interação será da forma:

$$X_K = X_{K-1} - \frac{f(X_{K-1})}{f'(X_{K-1})} .$$

Assim, com os dados obtidos deste projeto, criamos uma tabela na qual o algoritmo parte de um valor de xo inicial e chega ao valor de $f(x) = 0$ ou no máximo de interações estabelecidas, que neste caso é no máximo de 20 interações.

Nessa tabela , analisaremos se o processo converge, e também o custo computacional do método.

Tabela 2 - Método de Newton com erro de 0.0001 ou 20 iterações		
x_0	$\bar{x}$	iterações
-20.0	3.6037324491886733	20
-10	3.603732449188683	12
-5	3.603732449189166	8
-2	3.6037324491861824	6
0	3.6037324507520503	4
3	3.6037324491880582	3
4	3.6037324491872385	3
7	3.6037324502245793	4
10	3.6037324492147604	5
30	3.603732449846769	9

Com isto, temos que o método de Newton é bem eficaz para convergência do valor desejado da raiz, uma vez que o mesmo possui convergência quadrática.

Além disso, com poucas interações interações, o algoritmo conseguiu a precisão do valor exato da raiz r = 3.60373 de 4 casas decimais, apresentando um resultado de 1 casa de decimal de maior precisão em menos iterações do algoritmo, comparado ao método da bissecção

Porém, este método possui a desvantagem que envolve o cálculo das derivadas de f'(X_K) e f''(X_K) em cada iteração do algoritmo, no qual, para expressões de derivadas mais complexas, eleva o custo computacional para seu cálculo.

Outra desvantagem é referente a f'(X_{K-1}), pois caso esta derivada seja um número muito elevado, sua convergência será lenta, devido ao fato de que $\frac{f(X_{K-1})}{f`(X_{K-1})} \to 0$, por consequência de que f'(X_{K-1}) >> f (X_{K-1}), fazendo que o algoritmo demore para convergir ao valor esperado.

Além disso, caso f'(X_{K-1}) seja um número próximo de zero, teremos um caso onde dará overflow, uma vez que $\frac{f(X_{K-1})}{f`(X_{K-1})} \to \infty$, fazendo com o que o método numérico se perca na representação decimal.

Conclusão

Os dois métodos tiveram resultados bem satisfatórios, analisando os resultados obtidos pelas tabelas, podemos notar que os resultados estão próximos, apesar do alto número de iterações no processo do método da Bissecção, o método nos dá uma aproximação muito boa considerando que antes tínhamos apenas um intervalo onde a solução poderia estar, porém, caso não haja solução no intervalo, não haverá convergência.

No caso do método de Newton, o cálculo de derivadas gera um custo computacional elevado, porém, é um método de convergência quadrática e converge sempre que $f(x)$, $f'(x)$ e $f''(x)$ forem contínuas num intervalo I que contenha a raiz de $f(x)$=0, supondo $f'(x) \neq 0$ e $f''(x) \neq 0$. Como comparação, tomemos as raízes com menos interações nos dois casos para analisar qual método chega mais próximo de $f(x)$=0.

Pelo Método da Bissecção, temos:

$$f(3.6036990722656252) = \; -0.000015218761713509 11$$

$$f(3.6037700195312503) = 0.0000171308852037199\,.$$

E para o Método de Newton, obtivemos os seguintes resultados :

$$f(3.6037324491880582) = 8.62865 \cdot 10^{-13}$$

$$f(3.6037324491872385) = 4.89386 * 10^{-13}\,.$$

Para um erro de 0.0001, os valores dos dois são ótimos, porém, para o método de Newton, se obtém um valor muito mais próximo, com menos iterações.

Referências bibliográficas :

[1] http://www.decom.ufop.br/marcone/Disciplinas/CalculoNumerico/Equacoes.pdf

[2] **Calculo Numerico - Aspectos Teoricos E Computacionais - 2ª Edição**