Exercício de Programa 1

Caio Vnícius Dadauto 7994808

02 de abril de 2013

Problema (a)

Análise

Tem-se que a função $f(x)$ é dada por:

$$f(x) = x^3 - \cos(x^2) \tag{1}$$

Como $0 \leq \cos(x^2) \leq 1$ para $0 \leq x \leq 1.26$ e, ainda, sabendo que x^3 é crescente $\forall x \in \mathbb{R}$, pode-se inferir que,

$$0 < \xi < 1.26 \sim \sqrt{\pi/2}$$

onde ξ é a raiz de $f(x)$.

Tendo em vista o método da bisseção para aproximar ξ, é possível (a partir da inferencia acima) assumir que os pontos iniciais x_1 e x_2 podem assumir o valor de 0 e 1.26, respectivamente. Uma vez, que $f(x_1)f(x_2) < 0$ o que satisfaz a hipótese inicial para o método da bisseção.

Estimado os valores iniciais de x_1 e x_2, é possível implementar o seguinte código para aproximar ξ através do método da bisseção.

Programa 1: Implementação para o método da bisseção.

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#define EPS 0.0001

```

```c
void impime (FILE *saida, double a, double b, double x_m, int k);
double erro_relativo (double a, double b);
double funcao (double x);

double erro_relativo (double a, double b) {
  if (a - b < 0)
    return (b - a) / ((a + b) / 2);
  return (a - b) / ((a + b) / 2);
}

double funcao (double x) {
  return x * x * x - cos (x * x);
}

void imprime (FILE *saida, double a, double b, double x_m, int k) {
  fprintf (saida, "%d & %.4f & %.4f & %.4f & %.4f & %.4f & %.4f\\\\\n",
  k, a, b, x_m, funcao (a), funcao (b), funcao(x_m));
  fprintf (saida, "\\midrule\n");
}

int main () {
  int
    k = 1;
  FILE
    *arquivo;
  double
    x_m,
    a = 0,
    b = 1.26;

  arquivo = fopen ("bi.tex", "w");
  while ( erro_absoluto (a, b) > EPS) {
    x_m = (a + b) / 2;
    imprime (arquivo, a, b, x_m, k);
    if (funcao (x_m) * funcao (a) > 0)
      a = x_m;
    else
      b = x_m;
    ++ k;
  }
  fprintf (arquivo, "\\multicolumn{7}{c}{\\n{Raiz}}\\\\\n");
  fprintf (arquivo, "\\multicolumn{7}{c}{%.4f}\\\\\n", x_m);
  fclose (arquivo);
  return 0;
}
```

Resultados

Após ter executado o programa, obteve-se os resultados apresentados na tabela 1.

Interação (k)	x_1	x_2	x_m	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_m)$
1	0.0000	1.2600	0.6300	-1.0000	2.0172	-0.6722
2	0.6300	1.2600	0.9450	-0.6722	2.0172	0.2169
3	0.6300	0.9450	0.7875	-0.6722	0.2169	-0.3254
4	0.7875	0.9450	0.8663	-0.3254	0.2169	-0.0814
5	0.8663	0.9450	0.9056	-0.0814	0.2169	0.0606
6	0.8663	0.9056	0.8859	-0.0814	0.0606	-0.0121
7	0.8859	0.9056	0.8958	-0.0121	0.0606	0.0238
8	0.8859	0.8958	0.8909	-0.0121	0.0238	0.0058
9	0.8859	0.8909	0.8884	-0.0121	0.0058	-0.0032
10	0.8884	0.8909	0.8896	-0.0032	0.0058	0.0013
11	0.8884	0.8896	0.8890	-0.0032	0.0013	-0.0010
12	0.8890	0.8896	0.8893	-0.0010	0.0013	0.0001
13	0.8890	0.8893	0.8892	-0.0010	0.0001	-0.0004
14	0.8892	0.8893	0.8892	-0.0004	0.0001	-0.0001
Raiz (ξ)						
0.8892						

Tabela 1: Resultados obtidos no método da bisseção.

Tem-se que a derivada de $f(x)$ é:

$$f'(x) = 3x^2 + 2x\sin(x^2) \tag{2}$$

A partir da derivada, pode-se inferir que $f'(x) > 0$ para $x \geq -2/3$. Assim, pelo teorema do valor médio, tem-se que $f(x)$ é crescente para $x \geq -2/3$. Como $f(-2/3) < 0$ e $f(x) > 0$ para algum x maior que $-2/3$, por exemplo $x = 1,6$, $f(x)$ possui somente uma raiz real para $x \geq -2/3$. Por outro lado, $f(x) < 0$ para $x < -2/3$, o que implica que $f(x)$ não possui raiz real para $x < -2/3$. Logo $f(x)$ possui somente uma raiz real.

Problema (b)

Análise

Para estimar a mesma raiz (ξ) de $f(x)$ pelo método de Newton-Raphson é necessário que

$$\varphi'(c) < 1 \qquad \text{para } x_k < c < \xi \tag{3}$$

$$f'(x_k) \neq 0 \tag{4}$$

onde x_k é o valor da variavel livre de $f(x)$ na k-ésima interação e $\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$.

Derivando $f'(x)$, obtem-se que:

$$f''(x) = 6x + 2\sin(x^2) + 4x^2\cos(x^2) \tag{5}$$

Como $0 \leq 2\sin(x^2) + 4x^2\cos(x^2) \leq 2$ para $0 \leq x \leq \pi/2$ é possível inferir que $f''(x) > 0$ para $0 \leq x \leq \pi/2$. Logo, tem-se que, pelo teorema do valor médio, $f'(x)$ é crescente para $0 \leq x \leq \pi/2$. Assim, para $0 \leq x \leq \pi/2$, $f'(x)$ possui apenas a raiz trivial $x = 0$. Somente o intervalo $0 \leq x \leq \pi/2$ é considerado, pois sabe-se que $\xi \sim 0.89$.

Sendo $\varphi(x)$ dado por,

$$\varphi(x) = x - \frac{(x^3 - \cos(x^2))}{3x^2 + 2x\sin(x^2)} \tag{6}$$

tem-se que sua derivada é dada por,

$$\varphi'(x) = \frac{(6x + 2\sin(x^2) + 4x^2\cos(x^2))(x^3 - \cos(x^2))}{(3x^2 + 2x\sin(x^2))^2} \tag{7}$$

como, para o método de Newton-Raphson, $\varphi(c) < 1$, tem-se que,

$$\varphi'(x) = \frac{(6x + 2\sin(x^2) + 4x^2\cos(x^2))(x^3 - \cos(x^2))}{(3x^2 + 2x\sin(x^2))^2} < 1 \tag{8}$$

$$4x^5\cos(x^2) - (6x\cos(x^2) + 10x^3\sin(x^2) + \sin(2x^2) + 3x^4 + 4x^2) < 0 \tag{9}$$

A partir da equação (9) é possível concluir que $\varphi'(x) < 1$ para $0 < x \leq 1$. Pois, $4x^5 \cos(x^2) < 6x \cos(x^2)$ para $0 < x \leq 1$.

Assim, é possível tomar como ponto inicial (x) para a execução do método de Newton-Raphson o valor de 1. O código para estimar ξ pelo método de Newton-Raphson é apresentado logo abaixo.

Programa 2: Implementação para o método da Newton-Raphson.

```c
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#define EPS 0.0001

void imprime (FILE *saida, double a, int k);
double erro_relativo (double a, double b);
double derivada (double x);
double funcao (double x);
double phi (double x);


double erro_relativo (double a, double b) {
   if (a - b < 0)
      return (b - a) / b;
   return (a - b) / b;
}

double phi (double x) {
   return x - (x * x * x - cos (x * x)) /
   (3 *x * x + 2 *x * sin (x * x));
}

double derivada (double x) {
   return 3 *x * x + 2 *x * sin (x * x);
}

double funcao (double x) {
   return x * x * x - cos (x * x);
}

void imprime (FILE *saida, double a, int k) {
   fprintf (saida, "%d & %.4f & %.4f & %.4f\\\\\n",
   k, a, funcao (a), derivada (a));
   fprintf (saida, "\\midrule\n");
}
```

```c

int main () {
   FILE
      *arquivo;
   int
      k = 1;
   double
      x = 1,
      x_1;

   arquivo = fopen ("new.tex", "w");
   x_1 = phi (x);
   while (erro_relativo(x_1, x) > EPS) {
      imprime (arquivo, x_1, k);
      x = x_1;
      x_1 = phi (x);
      ++ k;
   }
   fprintf (arquivo, "\\multicolumn{4}{c}{\\n{Raiz}}\\\\\n");
   fprintf (arquivo, "\\toprule[0.11em]\n");
   fprintf (arquivo, "\\multicolumn{4}{c}{%.4f}\\\\\n", x_1);
   fclose (arquivo);
   return 0;
}
```

Resultados

Após ter executado o programa, obteve-se os resultados apresentados na tabela 2.

Interação (k)	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$
1	0.9018	0.0464	3.7504
2	0.8895	0.0007	3.6386
3	0.8893	0.0000	3.6369
Raiz (ξ)			
0.8893			

Tabela 2: Resultados obtidos no método da Newton-Raphson.

Problema (c)

Análise

Assume-se que o potêncial de interação em função da distância (r) entre os íons de uma molécula diatômica é dado por:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V_0 \exp\left(-r/r_0\right) \tag{10}$$

onde ϵ_0 é a permissividade do vácuo, e é a caraga do elétron e V_0 e r_0 são parâmetros de ação efetiva.

Usando os parâmetros cristalinos ($V_0 = 1.38 \cdot 10^3$eV e $r_0 = 0.328$Å) e assumindo que $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 14.4$VÅ, é possível plotar o gráfico da funçãoo (10). O qual é apresentado na figura 1.

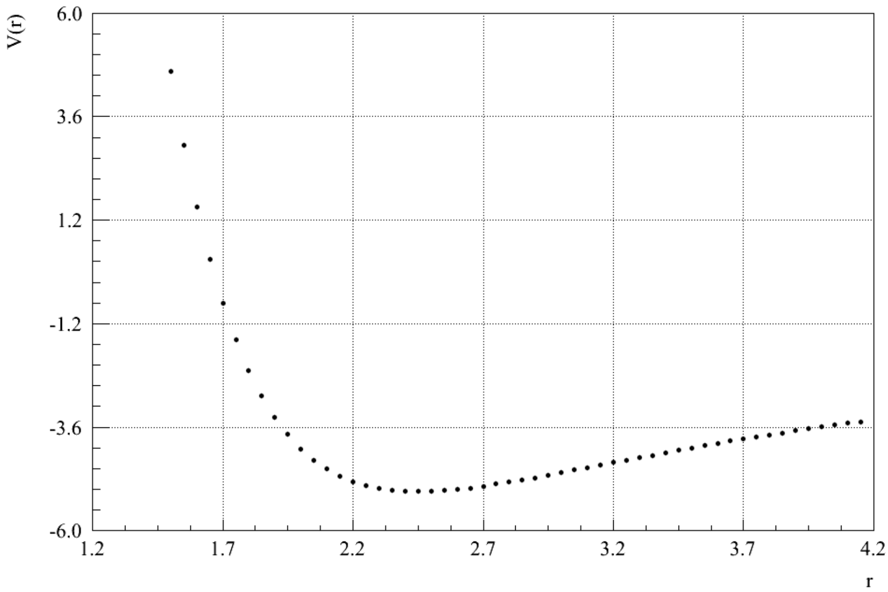

Figura 1: Gráfico da V(r) por r.

Sabendo que a força que atua entre os átomos é dada por:

$$F(r) = -\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} + \frac{V_0}{r_0} \exp\left(-r/r_0\right) \tag{11}$$

Plotando o gráfico dado pela função (11), obtem-se o seguinte conjunto de pontos.

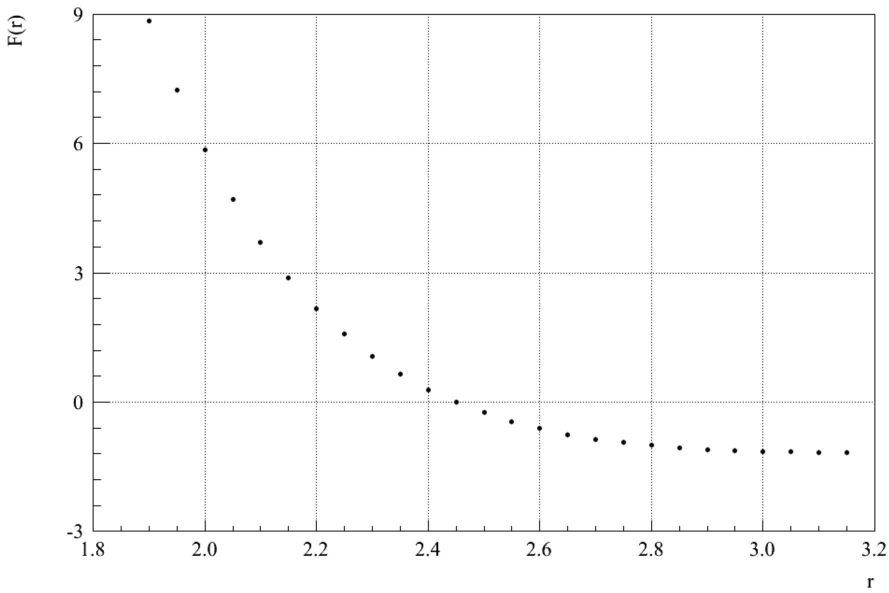

Figura 2: Gráfico da F(r) por r.

Para que os átomos estejam em equilíbrio e ainda interagindo entra si é necessario que estes estejam espaçados de uma distância (r_{eq}) que equivale ao ponto de mínimo da função $V(r)$, o que implica que $F(r) = 0$.

Tendo como objetivo estimar a distância (r_{eq}) através do método das secantes e analisando o gráfico da figura 2 é possível adotar os valores de 2 e 3 para os pontos iniciais x_1 e x_2, respectivamente. Pois é facilmente perceptivel que a raiz de $F(r)$ está no intervalo $2 < r < 3$ de forma a minimizar $V(r)$.

Novamente analizando o gráfico da figura 2 é possível inferir que a derivada de $F(r)$ não é zero dentro do intervalo $2 < r < 3$. Pois, a reta tangente ao gráfico da figura 2 não é paralela a abscissa dentro do intervalo $2 < r < 3$.

Assim, implementou-se o código para estimar r_{eq} através do método das secantes. Código que segue logo abaixo.

Programa 3: Implementação para o método das secantes.

```c
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#define EPS 0.0001

void impime (FILE *saida, double a, double b, double x_m, int k);
double erro_relativo (double a, double b);
double funcao (double x);

double erro_relativo (double a, double b) {
   if (a - b < 0)
      return (b - a) / a;
   return (a - b) / a;
}

double phi (double x_1, double x_2) {
   return x_2 - ((funcao (x_2) * (x_2 - x_1)) /
   (funcao (x_2) - funcao (x_1)));
}

double funcao (double x) {
   return -14.4 / (x * x) + (1.38E3 / 0.328) * exp ((-1 * x) / 0.328);
}

void imprime (FILE *saida, double a, int k) {
   fprintf (saida, "%d & %.4f & %.4f\\\\\n",
   k, a, funcao (a));
   fprintf (saida, "\\midrule\n");
}

int main () {
   int
      k = 1;
   FILE
      *arquivo;
   double
      x_1 = 2,
      x_2 = 3,
      x;

   arquivo = fopen ("sec.tex", "w");
   while (erro_relativo (x_1, x_2) > EPS) {
      x = phi (x_1, x_2);
      x_2 = x_1;
      x_1 = x;
```

```c
      imprime (arquivo, x, k);
      ++k;
   }

   fprintf (arquivo, "\\multicolumn{3}{c}{\\n{Raiz (r_{eq})}}\\\\\n");
   fprintf (arquivo, "\\multicolumn{3}{c}{%.4f}\\\\\n", x);
   fclose (arquivo);
   return 0;
}
```

Resultados

Após ter executado o programa, obteve-se os resultados apresentados na tabela 3.

Interação (k)	x_k	$F(x_k)$
1	2.8358	-1.0506
2	2.7087	-0.8724
3	2.0866	3.9568
4	2.5963	-0.6005
5	2.5291	-0.3665
6	2.4240	0.1465
7	2.4540	-0.0212
8	2.4502	-0.0010
9	2.4500	0.0000
Raiz ($\mathbf{r}_{eq}$)		
2.4500		

Tabela 3: Resultados obtidos no método das secantes.