

INSTRUÇÕES GERAIS

Data de entrega: Até 25/09/2018.

A nota do projeto será usada para compor a média final.

Deverá ser entregue pessoalmente (no horário da aula) ou por e-mail (usando e-mail acadêmico) até as **23:59 do dia 25/09/2018**. Após este momento, não será mais aceito.

Pode ser desenvolvido em grupo de **no máximo** dois alunos.

Trabalhos idênticos feitos por grupos diferentes serão ambos zerados.

A linguagem de programação fica a critério do aluno ou grupo, recomendando-se porém o uso de linguagens mais conhecidas, como Matlab/Octave, C, Python, Java e outras.

O código deve seguir o algoritmo apresentado no material didático. O uso de funções prontas que resolvem o problema em uma linha não será aceito.

O material a ser entregue deverá incluir as **rotinas computacionais** utilizadas (código-fonte) e um **texto contendo uma discussão crítica** acerca dos métodos utilizados e dos resultados obtidos.

Neste texto, justifique todas as etapas do desenvolvimento do projeto, faça uso de gráficos ou tabelas para expor e comparar resultados, faça um resumo dos métodos numéricos utilizados e descreva seus algoritmos. Faça uma breve análise do custo computacional e dos erros de aproximação envolvidos. Não deixe de incluir ao final a bibliografia usada para dar suporte ao texto.

Soluções desconexas, sem um embasamento teórico e uma análise crítica dos resultados não serão consideradas.

MS211 - Cálculo Numérico

Turma K - Prof João Batista Florindo

Projeto 1

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 $\alpha = 0.2$ e $\beta = 2$ e determine o potencial que anula a densidade de corrente, isto é, encontre x tal que $f(x) = 0$.

- Encontre um intervalo que contenha uma raiz de $f(x)$, podendo-se utilizar algum software que plote o gráfico da função.
- Implemente os métodos da Bissecção e de Newton utilizando a linguagem de programação de preferência. Utilize como critério de parada uma tolerância $\underline{\epsilon}$ e um número máximo de iterações.
- Utilizando os programas implementados, encontre a raiz da equação de *Butler-Volmer* para diferentes pontos/intervalos iniciais. Faça tabelas para cada método que contenha os pontos iniciais (no caso do método da Bissecção, o intervalo inicial $[a, b]$), aproximação \bar{x} obtida e número de iterações. Siga o modelo dos exemplos abaixo (cujos valores são fictícios):

– Método da Bissecção

a	b	\bar{x}	iterações
1	2	0.90215273	15
0	1	0.50095418	17
0	5	0.48633729	18

– Método de Newton

x_0	\bar{x}	iterações
0	0.5119264	4
0.5	0.5119264	4
5	0.5119264	5

Referências

- [1] RUGGIERO, M., LOPES, V. *Cálculo Numérico - Aspectos Teóricos e Computacionais*. Segunda Edição. Pearson: 1997.
- [2] BURDEN, R., FAIRES, J. *Análise Numérica*. Pioneira Thomson Learning: 2003.
- [3] ARENALES, S., DAREZZO, A. *Cálculo Numérico - Aprendizagem com Apoio de Software*. Thomson Learning: 2008.
- [4] QUARTERONI, A., SALERI, F., GERVASIO, P. *Scientific Computing with Matlab and Octave*. Third Edition. Springer: 2010.