EP1 - Cálculo Numérico

Nicholas Funari Voltani - Nº USP: 9359365

22 de Agosto de 2019

O código para a resolução dos problemas foi escrito em Python (versão 3.7), e os gráficos foram feitos no Desmos.

1 Raizes de $f(x) = x^3 - \cos(x^2)$

Temos que a função

$$f(x) = x^3 - \cos(x^2)$$

somente possui uma raiz, entre 0 e 1, como pode-se ver pelo gráfico na figura 1.

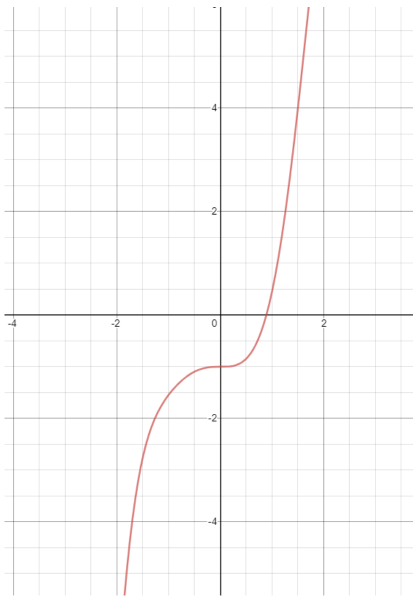

Figura 1: Gráfico de $f(x) = x^3 - \cos(x^2)$.

1.1 1a) Obtendo a raiz via método da bissecção

Code 1: 1a) Código para o método da bissecção.

```
## Metodo da Bisseccao

import math

def f(x):
    return x**3 - math.cos(x**2)

## Pontos iniciais
x1=0
x2=1

## Tamanho do Intervalo
delta=abs(x2-x1)

```

```
## Ponto Medio
xm=(x1+x2)/2

## Numero da iteracao
i=1

## Precisao desejada
erro = 0.0001

while delta > erro:
    print('{0} & {1} & {2}\\\\'.format(i,xm,delta))
    if f(x1)*f(xm)>0:
        ##sinal f(xm) = sinal f(x1)
        x1=xm
    else:
        ## sinal f(xm) = sinal f(x2)
        x2=xm

    xm=(x1+x2)/2
    delta = abs(x2-x1)
    i+=1

## Ultimo ponto da iteracao
print('{0} & {1} & {2}\\\\'.format(i,xm,delta))
```

1.2 1b) Obtendo a raiz via método de Newton-Raphson

Code 2: 1b) Código para o método de Newton-Raphson.

```
## Metodo de Newton-Raphson

import math

## Funcao inicial
def f(x):
    return x**3 - math.cos(x**2)

## Derivada de f(x)
def g(x):
    return 3*x**2 + 2*x*math.sin(x**2)

## Chute Inicial
xi = 1
## Proximo ponto por Newton-Raphson
xf = xi - f(xi)/g(xi)

## Precisao desejada da raiz
erro = 0.0001

## Numero da iteracao
i=1

## Iteracao em Newton-Raphson
while abs(xf-xi)>erro:
    print('{0} & {1} & {2} & {3}\\\\'.format(i, xi, xf, abs(xi-xf)))
    xi = xf
    xf = xi - f(xi)/g(xi)
    i+=1

## Ultimo ponto da iteracao
print('{0} & {1} & {2} & {3}\\\\'.format(i, xi, xf, abs(xi-xf)))
```

As respectivas tabelas 1 e 2 com os *prints* das raizes estão no apêndice. Infere-se que a raiz é aproximadamente 0.889. Nota-se claramente, pelas tabelas, que o método de Newton-Raphson converge mais rápido que o da bissecção.

2 Distância de equilíbrio de NaF

Temos que o potencial de interação entre Na^+ e F^- é

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

e que a força entre os íons é

$$F(r) = -\frac{dV}{dr}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} + \frac{V_0}{r_0}\exp\left(-\frac{r}{r_0}\right)$$

Buscamos a distância de equilíbrio dos íons, i.e., uma raiz de $F(r)$, via método das secantes. Pelos gráficos na figura 2, infere-se que o ponto de equilíbrio ($F = 0$, V mínimo) está entre 1.5 e 2; usamos estes pontos como os pontos iniciais no método das secantes.

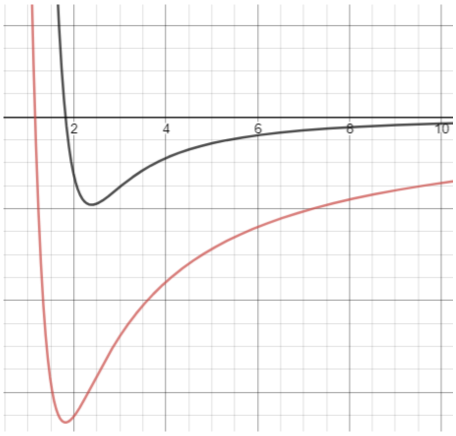

Figura 2: Gráficos de potencial (vermelho) e força (preto) de NaF.

Code 3: Código do método das secantes; letra c)

```
## Metodo das Secantes
import math

## Constantes
V0 = 0.667e+3 #eV
r0 = 0.290 #Angstroms
k = 14.4 #eV Angstrom , =e^2/4*pi*epsilon0

## Potencial, em eV
def V(r):
    return -k/r + V0*math.exp(-r/r0)

## Forca, em eV/Angstrom
def F(r):
    return -k/r**2 + (V0/r0)*math.exp(-r/r0)


## Iteracao

## Pontos Iniciais
x1 = 1.5
x2 = 2

xf = (x1*F(x2) - x2*F(x1))/(F(x2)-F(x1))

## Numero da Iteracao
i=1
## Precisao desejada
erro = 0.0001

```

```python
while abs(xf-x2)> erro:
    print('{0} & {1} & {2}\\\\'.format(i,xf,abs(xf-x2)))
    x1,x2 = x2,xf
    xf = (x1*F(x2) - x2*F(x1))/(F(x2)-F(x1))
    i+=1

## Ultimo ponto da iteracao
print('{0} & {1} & {2}\\\\'.format(i,xf,abs(xf-x2)))
```

Infere-se que a distância de equilíbrio de NaF é de cerca de 1.818 $\mathring{A}$, vide tabela 3 no apêndice.

A Raíz de $x^3 - \cos(x^2)$

Tabela 1: Raizes de $x^3 - \cos(x^2)$, via método da bissecção, até erro menor que 10^{-4}.

Iteração n	Raiz Aproximada	Erro $1/2^{n-1}$
1	0.5	1
2	0.75	0.5
3	0.875	0.25
4	0.9375	0.125
5	0.90625	0.0625
6	0.890625	0.03125
7	0.8828125	0.015625
8	0.88671875	0.0078125
9	0.888671875	0.00390625
10	0.8896484375	0.001953125
11	0.88916015625	0.0009765625
12	0.889404296875	0.00048828125
13	0.8892822265625	0.000244140625
14	0.88922119140625	0.0001220703125
15	0.889251708984375	6.103515625e-05

Tabela 2: Raizes de $x^3 - \cos(x^2)$, via método de Newton-Raphson, até erro menor que 10^{-4}.

Iteração n	Ponto anterior x_{n-1}	Raiz aproximada x_n	Erro: $\lvert x_n - x_{n-1}\rvert$
1	1	0.9018357056067523	0.0981642943932477
2	0.9018357056067523	0.8894714726719396	0.012364232934812702
3	0.8894714726719396	0.8892811200058061	0.00019035266613354196
4	0.8892811200058061	0.8892810752554774	4.475032866491091e-08

B Distância de equilíbrio em NaF

Tabela 3: Distância de equilíbrio em NaF, via método das secantes, até erro menor que 10^{-4}.

Iteração n	Distância de Equilíbrio ($\mathring{A}$)	Erro ($\mathring{A}$)
1	1.9195354927602615	0.08046450723973853
2	1.7646686706946164	0.15486682206564506
3	1.8300144171181087	0.06534574642349233
4	1.819300540033008	0.010713877085100743
5	1.8179418165858245	0.001358723447183463
6	1.817976535149251	3.471856342640578e-05