EP1

VICENTE V. FIGUEIRA, NUSP: 11809301

Programa 1. Zeros de Funções. Bisseção, Newton-Raphson, Secantes

1.(A)

Como requerido pelo enunciado, iremos utilizar do método da Bissecção para obter uma solução numérica das raízes da função,

$$f(x) = x^{\frac{3}{4}} - \cos\left(x^2\right) \tag{1.1}$$

Conforme o método da Bissecção, escolhemos dois valores iniciais, 'x_0' e 'x_1', tais que '$x_0 < x_1$' e havendo uma raíz contida neste intervalo. Para a escolha destes valores iniciais, notamos que, cosseno é uma função com valor limitado por '1', e que a função '$x^{\frac{3}{4}}$' esta definida apenas no intervalo '$\mathbb{R}^+$' sendo monotônica estritamente crescente em seu domínio, sabemos a solução única de

$$x^{\frac{3}{4}} = 1 \Rightarrow x = 1$$

Sabemos ainda que o primeiro zero da função cosseno em '$\mathbb{R}^+$' ocorre em '$\frac{\pi}{2}$', e como '$0 < 1 < \frac{\pi}{2}$', segue que,

$$0 < \cos(1) < 1 \tag{1.2}$$

Como é verdade também que cosseno é monotônica estritamente decrescente no intervalo de '$\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$' segue que também é monotônica estritamente decrescente no intervalo de '$[0,1]$' — Apesar de termos analizado para '$\cos(x)$', como 'x^2' é monotônica estritamente crescente no intervalo '$[0,1]$', segue que '$\cos\left(x^2\right)$' continuará sendo monotônica estritamente decrescente no mesmo intervalo —. Concluimos que,

- Se há zeros de '$f(x)$', estes pertencem ao intervalo '$[0,1]$'
- '$x^{\frac{3}{4}}$' é monotônica estritamente crescente no itervalo '$[0,1]$'
- '$\cos\left(x^2\right)$' é monotônica estritamente decrescente no itervalo '$[0,1]$'

Fato de '$\cos\left(x^2\right)$' ser decrescente implica que '$-\cos\left(x^2\right)$' é crescente, logo, '$f(x)$' é a soma de duas funções crescentes, que continua sendo uma função crescente,

- Se há zeros de '$f(x)$', estes pertencem ao intervalo '$[0,1]$'
- '$f(x)$' é monotônica estritamente crescente no itervalo '$[0,1]$'

Estes dois fatos por si indicam que se há uma raíz, esta é única, pois para haver mais de uma raíz seria necessário que a função trocasse de monotonicidade em algum intervalo de seu domínio.

- Se há zeros de '$f(x)$', este é único e pertence ao intervalo '$[0,1]$'
- '$f(x)$' é monotônica estritamente crescente no itervalo '$[0,1]$'

Para concluírmos sobre a existência do único zero, analizemos o comportamento da função sobre a fronteira do intervalo.

$$f(0) = 0^{\frac{3}{4}} - \cos(0) = -1 f(1) = 1^{\frac{3}{4}} - \cos(1) = 1 - \cos(1) > 0$$

Isto é, '$f(0) < 0 < f(1)$',

- Se há zeros de '$f(x)$', este é único e pertence ao intervalo '$[0,1]$'
- '$f(x)$' é monotônica estritamente crescente no itervalo '$[0,1]$'
- '$f(x)$' troca de sinal no intervalo '$[0,1]$'

Para concluir a existência de uma raíz, temos que utilizar de mais uma propriedade da função,

- Se há zeros de '$f(x)$', este é único e pertence ao intervalo '$[0,1]$'
- '$f(x)$' é monotônica estritamente crescente no itervalo '$[0,1]$'
- '$f(x)$' troca de sinal no intervalo '$[0,1]$'
- '$f(x)$' é contínua no intervalo '$[0,1]$'

Os três últimos fatos implicam que a função possui um zero neste intervalo, a hipótese da continuidade é crucial, do contrário a função poderia ser monotônica estritamente crescente e trocar de sinal via uma discontinuidade de tipo salto. Logo somos levados a seguinte conclusão,

- '$f(x)$' possui um único zero no intervalo '$[0,1]$'

Que pode ser extendida para o maior domínio da função ao notar que

$$\forall x \in [1,\infty), \quad x^{\frac{3}{4}} > \cos\left(x^2\right) \Rightarrow \forall x \in [1,\infty), \quad f(x) > 0 \tag{1.3}$$

Assim, sobre todo o domínio da função concluímos que esta possui apenas um zero,

- '$f(x)$' possui um único zero em seu domínio '$\mathbb{R}^+$', sendo este zero contido em '$[0,1]$'

Portanto um bom palpite para valores iniciais dos parâmetros é '$x_0 = 0$' e '$x_1 = 1$'. Para decidir sobre o valor do erro aceitável, nos utilizamos de '10^{-6}', que se faz uma precisão aceitável do ponto de vista que o Python se utiliza por padrão de precisão double que excede este valor de casas decimais. A seguir está o código utilizado para rodar o método da Bissecção.

```python
import math
import tabulate

#Variáveis necessárias

vPrecisao = 1.E-6

#Função que desejamos encontrar os zeros

def fZero(x):
    return x**(3/4) - math.cos(x**2)

#Método que adiciona os dados de cada passo em uma tabela

def fTabDados(vIteracao, vInicial, vFinal, vMedio, fZero):

    tTemp = []
    tTemp.append(vIteracao)
    tTemp.append(vInicial)
    tTemp.append(vFinal)
    tTemp.append(vMedio)
    tTemp.append(fZero(vInicial))
    tTemp.append(fZero(vFinal))
    tTemp.append(vFinal-vInicial)

    return tTemp

#Definição do algorítimo do Método da Bissecção

def MetodoBissecao( fZero, #Função da qual queremos encontrar os zeros
                vInicial, #Valor inicial do intervalo
                vFinal): #Valor Final do Intervalo

    tDados = [["n","x_0","x_1","x_m","f(x_0)","f(x_1)","Erro"]] #Tabela de Dados

    vIteracao = 0

    #Loop que roda o método até atingir a precisão requerida
    while abs(vInicial - vFinal) > vPrecisao:

        vMedio = (vInicial + vFinal)/2 #Ponto médio do Intervalo

        tDados.append(fTabDados(vIteracao, vInicial, vFinal, vMedio, fZero)) # Dados colocados na tabela

        vIteracao = vIteracao + 1

        if ( (fZero(vInicial) * fZero(vMedio)) > 0 ): #Condicional principal do método
            vInicial = vMedio
        else:
            vFinal = vMedio

    tDados.append(fTabDados(vIteracao, vInicial, vFinal, vMedio, fZero))

    return vInicial, tDados

```

```
pRaiz, tDados = MetodoBissecao(fZero, 0, 1) #Inicia o método com a função e os valores desejados requeridos

print("A raiz da função é: %.6f" %pRaiz) #Print da Raíz
print()
print(tabulate.tabulate(tDados, headers='firstrow', tablefmt='latex')) #Print dos dados em formato de LaTex
```

Utilizando este método foi obtido o seguinte conjunto de dados relacionados com a convergência do método.

n	x_0	x_1	x_0	$f(x_0)$	$f(x_1)$	Erro
0	0	1	0.5	-1	0.459698	1
1	0.5	1	0.75	-0.374309	0.459698	0.5
2	0.75	1	0.875	-0.0399971	0.459698	0.25
3	0.75	0.875	0.8125	-0.0399971	0.183754	0.125
4	0.75	0.8125	0.78125	-0.0399971	0.0658942	0.0625
5	0.75	0.78125	0.765625	-0.0399971	0.0115372	0.03125
6	0.765625	0.78125	0.773438	-0.0145714	0.0115372	0.015625
7	0.773438	0.78125	0.777344	-0.00160397	0.0115372	0.0078125
8	0.773438	0.777344	0.775391	-0.00160397	0.00494472	0.00390625
9	0.773438	0.775391	0.774414	-0.00160397	0.00166493	0.00195312
10	0.773438	0.774414	0.773926	-0.00160397	2.91202e-05	0.000976562
11	0.773926	0.774414	0.77417	-0.000787763	2.91202e-05	0.000488281
12	0.77417	0.774414	0.774292	-0.000379406	2.91202e-05	0.000244141
13	0.774292	0.774414	0.774353	-0.000175164	2.91202e-05	0.00012207
14	0.774353	0.774414	0.774384	-7.30273e-05	2.91202e-05	6.10352e-05
15	0.774384	0.774414	0.774399	-2.19549e-05	2.91202e-05	3.05176e-05
16	0.774384	0.774399	0.774391	-2.19549e-05	3.58229e-06	1.52588e-05
17	0.774391	0.774399	0.774395	-9.18639e-06	3.58229e-06	7.62939e-06
18	0.774395	0.774399	0.774397	-2.80207e-06	3.58229e-06	3.8147e-06
19	0.774395	0.774397	0.774396	-2.80207e-06	3.90105e-07	1.90735e-06
20	0.774396	0.774397	0.774396	-1.20599e-06	3.90105e-07	9.53674e-07

1.(B)

Agora repetiremos a mesma tarefa de obter a raíz da função, porém, agora utilizando o método de Newton-Raphson, para este método necessitamos apenas de um valor inicial como parâmetro, podemos nos utilizar do método anterior como um chute para o parâmetro inicial deste método, observando os valores de convergência, podemos tomar '$x_0 = 0.8$', também como neste método a convergência é mais rápida, preferimos aumentar a precisão para '10^{-10}', assim o código utilizado tomou forma como,

```
import math
import tabulate

#Variáveis necessárias

vPrecisao = 1.E-10

#Função do método de Newton que calcula a próxima aproximação da raíz
def fNewton(x):
    return x - (x**(3/4) - math.cos(x**2))/((3/4)*(x**(-1/4)) + 2*x*math.sin(x**2))

#Função qual desejamos encontrar a raiz
def fZero(x):
    return x**(3/4) - math.cos(x**2)

#Derivada da função que desejamos encontrar a raíz
def fZeroD(x):
    return (3/4)*(x**(-1/4)) + 2*x*math.sin(x**2)

#Função que calcula o erro relativo entre uma aproximação e a próxima aproximação calculada pelo método de Newton
def fErro(x):
    return abs((fNewton(x)-x)/x)

#Método que organiza os dados em tabela
def fTabDados(vIteracao, vInicial, fZero, fErro):

    tTemp = []
```

```
    tTemp.append(vIteracao)
    tTemp.append(vInicial)
    tTemp.append(fZero(vInicial))
    tTemp.append(fZeroD(vInicial))
    tTemp.append(fErro(vInicial))

    return tTemp

#Valor inicial da aproximação da raiz
vInicial = 0.8

#Tabela de dados finais
tDados = [["n","x_n","f(x_n)","f'(x_n)","Erro"]]

vIteracao = 0

#Algorítimo do Método de Newton que roda enquanto o erro relativo for maior que a precisão requerida
while fErro(vInicial) > vPrecisao:

    tDados.append(fTabDados(vIteracao, vInicial, fZero, fErro))

    vIteracao = vIteracao + 1
    vInicial = fNewton(vInicial) #Substitui a aproximação antiga pela próxima calculada pelo método de Newton

tDados.append(fTabDados(vIteracao, vInicial, fZero, fErro))

print("A raiz da função é: %.10f" %vInicial) #Retona a aproximação encontrada para a raiz
print()
print(tabulate.tabulate(tDados, headers='firstrow', tablefmt='latex')) #Retorna a tabela de dados em formato de LaTex
```

Com este método podemos ver que a convergência ocorre rapidamente, em apenas '3' iterações com um valor de acordo com o encontrado pelo método anterior, como pode ser visto pela tabela a seguir,

n	x_n	$f(x_n)$	$f'(x_n)$	Erro
0	0.8	0.0438013	1.74854	0.0313127
1	0.7749498302	0.000926229	1.6752	0.000713474
2	0.7743969238	4.36101e-07	1.67362	3.36485e-07
3	0.7743966633	9.68114e-14	1.67362	7.46938e-14

1.(C)

Neste último item, somos incumbidos de obter a posição de equilíbrio de uma molécula diatômica de NaBr, que pode ser modelada com um potencial radial da forma,

$$V(r) = -\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} + V_0 \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \tag{1.4}$$

Para obter a posição de equilíbrio, temos que encontrar uma raiz da força desse sistema, isto é,

$$F(r) = -\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}(r) = -\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r^2} + \frac{V_0}{r_0}\exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \tag{1.5}$$

Vamos resolver este problema dando uma abordagem de quantidades adimensionais, por ser uma abordagem em que podemos utilizar o mesmo resultado para outras situações também, para isto vamos nos vantagear de saber as seguintes constantes,

$$K = \frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_0} = 1.44 \cdot 10 \text{ eVÅ} \tag{1.6}$$

$$V_0 = 1.38 \cdot 10^3 \text{ eV} \tag{1.7}$$

$$r_0 = 3.28 \cdot 10^{-1} \text{ eV} \tag{1.8}$$

Para escrever as versões adimensionais do Potencial e da Força, vamos escrever ambas como funções do parâmetro adimensional de distância '$x = \frac{r}{r_0}$' de forma que,

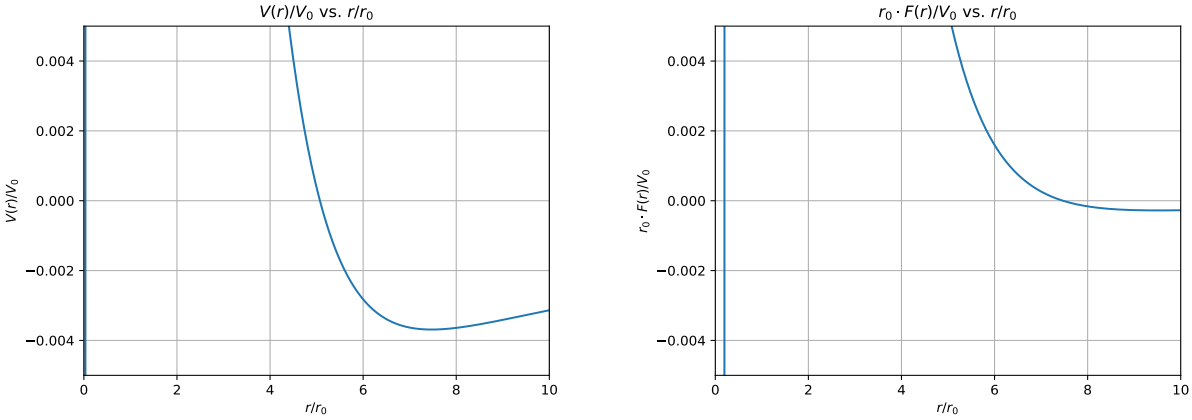
$$v(x) = \frac{V(r)}{V_0} = -\frac{K}{V_0 r_0}\frac{1}{x} + \exp(-x) \tag{1.9}$$

$$f(x) = \frac{r_0}{V_0}F(r) = -\frac{K}{V_0 r_0}\frac{1}{x^2} + \exp(-x) \tag{1.10}$$

Com o valor constante adimensional

$$\frac{K}{V_0 r_0} = \frac{1.44}{3.28 \cdot 1.38}10^{-1} \tag{1.11}$$

O gráfico de ambas as funções pode ser visto abaixo,



Nestes gráficos podemos ver claramente que há um mínimo do potencial entre '$x = 6$' e '$x = 8$' e que a força possui uma raiz entre '$x = 6$' e '$x = 8$'. O que nos permite fazer um chute para os dois parâmetros iniciais necessários para o método da secante, para os quais utilizamos os valores de '$x_0 = 6$' e '$x_1 = 6.5$', a precisão desejada foi fixada como '10^{-10}' pois também este método converge rapidamente, o código utilizado pode ser visto abaixo,

```python
import math
import tabulate

#Constantes Físicas utilizadas

vV_0 = 1.38E3 # eV
vR_0 = 3.28E-1 # Angstrom
vK = 1.44E1 # eV * Angstrom

#Variáveis necessárias

vPrecisao = 1E-10

#Função Potencial
def fPotencial(x):
    return -(vK/(vV_0*vR_0))/x+math.exp(-x)

#Função Força
def fForca(x):
    return -(vK/(vV_0*vR_0))/(x**2)+math.exp(-x)

#Método Secante que retorna a próxima aproximação partindo de dois pontos de aproximação
def fSecante(vInicial, vFinal):
    return vFinal - fForca(vFinal)*(vFinal - vInicial)/(fForca(vFinal) - fForca(vInicial))

#Função que retorna o erro relativo do segundo ponto de aproximação com a próxima correção calculada pelo método das secantes
def fErro(vInicial, vFinal):
    return abs((fSecante(vInicial, vFinal) - vFinal)/vFinal)

#Método para salvar dados em tabelas
def fTabDados(vIteracao, vInicial, vSegundo, fSecante, fForca, fErro):
```

```
32
33      tTemp = []
34      tTemp.append(vIteracao)
35      tTemp.append(vInicial)
36      tTemp.append(vSegundo)
37      tTemp.append(fSecante(vInicial, vSegundo))
38      tTemp.append(fForca(vSegundo))
39      tTemp.append(fForca(fSecante(vInicial, vSegundo)))
40      tTemp.append(fErro(vInicial, vSegundo))
41
42      return tTemp
43
44  #Valores iniciais para os dois parâmetros de aproximação necessitados pelo método das secantes
45  vInicial = 6
46  vSegundo = 6.5
47
48  tDados = [["n","x_{n-1}","x_{n}", "x_{n+1}","f(x_n)","f(x_{n+1})","Erro"]]
49
50  vIteracao = 0
51
52  #Loop principal do método que roda enquanto o erro entre a próxima correção for menor que a precisão requisitada
53  while fErro(vInicial, vSegundo) > vPrecisao:
54
55      #Adiciona dados na tabela
56      tDados.append(fTabDados(vIteracao, vInicial, vSegundo, fSecante, fForca, fErro))
57
58      vIteracao = vIteracao + 1
59
60      #Algorítimo do Método das secantes
61      vTemp = fSecante(vInicial, vSegundo) #Variável temporária que guarda o valor da próxima aproximação
62      vInicial = vSegundo #Transfere o valor da segunda aproximação para a primeira
63      vSegundo = vTemp #Transfere para a segunda aproximação a nova aproximação gerada pelo método
64
65  tDados.append(fTabDados(vIteracao, vInicial, vSegundo, fSecante, fForca, fErro))
66
67  print("O raio de equilíbrio é r_eq/r_0 = %.10f" %vSegundo) #Print da aproximação final
68  print()
69  print(tabulate.tabulate(tDados, headers='firstrow', tablefmt='latex')) #Print dos dados de cada iteração como forma de
    ↪  Tabela para LaTex
```

Utilizando este código foi obtido as seguintes aproximações,

n	x_{n-1}	x_n	x_{n+1}	$f(x_n)$	$f(x_{n+1})$	Erro
0	6	6.5	6.9442761991	0.00075046	0.000304424	0.0683502
1	6.5	6.9442761991	7.2474991215	0.000304424	0.000106287	0.0436652
2	6.9442761991	7.2474991215	7.4101566299	0.000106287	2.57075e-05	0.0224433
3	7.2474991215	7.4101566299	7.4620500379	2.57075e-05	3.13908e-06	0.00700301
4	7.4101566299	7.4620500379	7.4692679732	3.13908e-06	1.11164e-07	0.000967286
5	7.4620500379	7.4692679732	7.4695329653	1.11164e-07	5.05909e-10	3.54776e-05
6	7.4692679732	7.4695329653	7.4695341768	5.05909e-10	8.20651e-14	1.62192e-07
7	7.4695329653	7.4695341768	7.4695341770	8.20651e-14	-1.0842e-19	2.6314e-11

Aqui deve ser levado em conta que foi calculado a posição de equilíbrio adimensional, que no caso é, '$x = \frac{r}{r_0}$', para obter o valor em Angstrom, basta tomar,

$$r_{eq} = x_{eq} r_0 = 7.4695341770 \cdot 3.28 \cdot 10^{-1}\text{Å} = 2.4500072101\text{Å} \tag{1.12}$$

O erro calculado continua sendo o mesmo, pois este foi calculado como erro relativo, que de qualquer forma é adimensional, não sendo alterado por multiplicar a variável de interesse por uma constante