Exercício 1: Raízes e otimização de funções

Deve ser entregue relatório em 15 dias até a hora da aula.

1. **Raiz quadrada de um número:** para estimar o valor da raiz quadrada de um número pode-se usar métodos de encontrar os zeros de uma função do tipo x^2-C=0.
   a. Implemente o método da bissecção para calcular $\sqrt{4}$. Use como intervalo inicial [a,b]={[0.7,2.6];[0.4,1.7];[-3,0.6]}. Use como critério de convergência, $\epsilon = 10^{-5}$.
   b. Trace o gráfico do valor estimado de x em função do número de iterações para cada um dos intervalos (inclua todas as curvas no mesmo gráfico). Discuta a forma das linhas e os valores para os quais convergem.
   c. Implemente o método de Newton e o método da Secante para a mesma função.
   d. Trace o gráfico do logaritmo do valor do erro do método (valor que usaram para critério de convergência) em função do número de iterações para cada um dos três métodos implementados (coloque todas as curvas no mesmo gráfico). Discuta o gráfico.

2. **Corrente oscilante em circuitos:** a corrente oscilante num circuito pode ser descrita por $I = 9e^{-t}\sin(2\pi t)$, com I em mA.
   a. Usando o método de Newton, encontre os valores do tempo para os quais I=1.5mA, com uma precisão de 10^{-6} (Dica: use o Mathematica com a função F'[x], para confirmar o cálculo da derivada), usando como valores iniciais x0= {0.6,0.7,0.75,0.8,0.9}; Discuta o resultado dos diferentes valores de x0.
   b. Usando a função FindRoot no Mathematica, confirme os zeros encontrados. Discuta que método o Mathematica usou.

3. **Corpo preso a uma mola:** um corpo preso a uma mola esta sujeito a um potencial dado pela função 0.5*$(x-2)^2$.
   a. Implemente o método do número dourado para encontrar a posição de equilíbrio do corpo. Use como intervalo inicial [a,b]={[-0.7,2.6];[0.4,1.7]}. Use como critério de convergência, $\epsilon_r = 0.001\%$. Discuta o valor obtido para cada intervalo usado.
   b. Implemente o método do Gradiente para a mesma função. Use um máximo de 10 iterações, x0=0, uma precisão de $\epsilon = 1 \times 10^{-5}$, e valores da constante $\lambda = \{0.1;\ 0.5;\ 1;\ 2;\ 2.1\}$.
   c. Trace o gráfico dos valores do mínimo em função do número de iterações para cada λ (coloque todas as curvas no mesmo gráfico). Discuta o comportamento de cada curva.

4. **Distância em ligação iónica:** O potencial de interação entre o ião Na^+ e um ião Cl^- pode ser dado pela função:

$$U(r) = Ae^{-Br} - \frac{C}{r}$$

   a. Considerando *A*=80eV, *C*=10eVÅ, *B*=2$Å^{-1}$, e *r* a distância entre iões. Usando o método do gradiente encontre numericamente a distância de equilíbrio. Confirme o resultado com a função FindMinimum do Mathematica. Verifique qual a precisão usada pelo Mathematica.
   b. Considere o potencial agora em duas dimensões, *U(x,y)*, com $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Implemente o método do gradiente em duas dimensões para encontrar o mínimo *(x,y)* da função (Dica: confirme a derivada parcial usando a função D[U(x,y),x] e D[U(x,y),y] no Mathematica) usando como condições iniciais x_0 = 5 e y_0=-5. Trace o gráfico de *y* e *x* em função do número de interações (no mesmo gráfico) e coloque um inset (gráfico dentro de outro) com a trajetória (*y* em função de *x*). Use FindMinimum do Mathematica para confirmar o valor. Como se compara o novo mínimo encontrado com o da alínea b).

<u>Exercício 1 (opcional)</u>: Raízes e otimização de funções

Esta parte opcional não necessita de relatório.

1. **Projétil sem atrito:** um projétil é lançado de uma altura de $y_0 = 1$m, fazendo um ângulo θ_0 com a horizontal, com uma velocidade de $v_0 = 30m/s$. Pretende-se atingir um alvo que se encontra a uma altura de 1.8m e a uma distância x. A trajetória pode ser representada pela equação:

$$y = tan(\theta_0)x - \frac{g}{2v_0^2 cos^2(\theta_0)}x^2 + y_0$$

   a. Usando o método da secante ache os valores de θ_0 para x=90m. Indique numa tabela, para cada valor de θ_0 encontrado, os valores iniciais usados, o número de iterações e a precisão escolhida.
   b. Faça um gráfico tridimensional em Mathematica com a equação usada em função de θ_0 e x. Mostre graficamente os zeros da função (use a função Plot3D[]).
   c. Elabore um protocolo, usando qualquer um dos métodos anteriores, para calcular os zeros da mesma função, mas usando ambas as variáveis θ_0 e x como incógnitas. Faça um gráfico de x em função de θ_0.

2. **Corpo preso a uma mola:** um corpo preso a uma mola esta sujeito a um potencial dado pela função 0.5*(x-2)^2.
   a. Implemente o método do gradiente em C++ e em Python, para um máximo de iterações de 1×10^{10}, uma precisão de $\epsilon = 1 \times 10^{-10}$ e um $\lambda = 1 \times 10^{-7}$. Compare o tempo de cálculo de cada linguagem de programação. Faça um gráfico do tempo de cálculo em função do λ para as duas linguagens.
   b. Implemente um método similar ao do número de ouro, mas com outros rácios em vez do número de ouro. Compare a convergência do método. Como melhorava o algoritmo dado nas aulas de forma a ser mais eficiente?
   c. Implemente um protocolo para otimizar o valor de λ a cada passo no método do Gradiente.

3. **Distância em ligação iónica:** O potencial de interação entre o ião Na^+ e um ião Cl^- pode ser dado pela função:

$$U(r) = Ae^{-Br} - \frac{C}{r}$$

   a. Considerando *A*=80eV, *C*=10eVÅ, *B*=2Å^{-1}, e *r* a distância entre iões, represente graficamente a função e identifique a região onde se encontra a posição de equilíbrio entre os dois iões (mínimo).
   b. Aplique o método de Gradiente e de Newton para encontrar a mesma distância de equilíbrio. Trace o gráfico da posição de equilíbrio em função do número de iterações para os dois métodos (coloque as duas curvas no mesmo gráfico).
   c. Considere o potencial agora em duas dimensões, *U(x,y)*, com $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Faça um gráfico de contorno em Mathematica com a equação usada em função de *x* e *y* (use a função ContourPlot []). Discuta a posição do mínimo nesse gráfico.
   d. Implemente o método do Gradiente para U(x,y,z).