

MAP 2220 – FUNDAMENTOS DE ANÁLISE NUMÉRICA
2º. Semestre - 2023

Prof. Dr. Luis Carlos de Castro Santos

TRABALHO COMPUTACIONAL 3

Limite de entrega 07/01/2024 as 23:59

Considere o seguinte sistema de equações não-lineares:

Problem 10 (test problem 14.1.2 in [16]). Consider

$$\begin{aligned}x_1 x_2 + x_1 - 3x_5 &= 0, \\2x_1 x_2 + x_1 + 3R_{10}x_2^2 + x_2 x_3^2 + R_7 x_2 x_3 \\+ R_9 x_2 x_4 + R_8 x_2 - R x_5 &= 0, \\2x_2 x_3^2 + R_7 x_2 x_3 + 2R_5 x_3^2 + R_6 x_3 - 8x_5 &= 0, \\R_9 x_2 x_4 + 2x_4^2 - 4R x_5 &= 0, \\x_1 x_2 + x_1 + R_{10}x_2^2 + x_2 x_3^2 + R_7 x_2 x_3 + R_9 x_2 x_4 \\+ R_8 x_2 + R_5 x_3^2 + R_6 x_3 + x_4^2 - 1 &= 0, \\0.0001 \leq x_i \leq 100, \quad i = 1, \dots, 5,\end{aligned}\tag{15}$$

where $R = 10$, $R_5 = 0.193$, $R_6 = 4.10622 \times 10^{-4}$, $R_7 = 5.45177 \times 10^{-4}$, $R_8 = 4.4975 \times 10^{-7}$, $R_9 = 3.40735 \times 10^{-5}$, and $R_{10} = 9.615 \times 10^{-7}$.

The known solution in [16] is $(0.003431, 31.325636, 0.068352, 0.859530, 0.036963)^T$.

Esse problema busca encontrar as concentrações em equilíbrio de espécies químicas de um processo de combustão de hidrocarbonetos.

- Partindo da condição inicial $\vec{x}_0 = (10, 10, 10, 10, 10)$ encontre a solução para o problema usando o método de Newton. Para cada iteração apresente a solução estimada e a norma do resíduo do lado direito da equação. Atribua um critério de convergência e meça o tempo necessário para alcançar a convergência.
- Repita o problema usando o Método de Broyden.
- Compare os resultados e comente sobre os comportamentos observados e as expectativas teóricas, usando como referência todos os dados obtidos.

REGRAS GERAIS E OBSERVAÇÕES:

- Os módulos do python relativos a solução de problemas não-lineares e otimização **não** podem ser usados (scipy.optimize). Utilize o conhecimento teórico e os pseudo-código da referência para implementar os algoritmos.
- Os módulos relativos a soluções de sistemas lineares podem ser utilizados (scipy.linalg ou numpy.linalg)
- Pesquise formas de medir o tempo computacional e explique em seu relatório o que foi utilizado. A medida do tempo computacional pode requerer várias execuções do código para que a medida de tempo seja confiável. Encapsule o core do código num laço de for e divida pelo número de execuções. Atente-se a isso.
- Dependendo das condições iniciais pode ser necessário modificar as variáveis para que elas permaneçam dentro do domínio da solução. No caso de raízes de números negativos utilize o valor absoluto com prevenção.
- Inclua comentários no seu código esclarecendo suas escolhas e decisões de implementação.
- A entrega é um relatório, jupyter notebook pode ser usado, mas a entrega é um relatório em pdf que pode conter recortes trechos do jupyter notebook.
- A avaliação do trabalho não se limita apenas a obtenção dos resultados numéricos. Os resultados devem ser usados para suportar as análises que permitem comprovar as expectativas teóricas.