Practica 8. Raíces de una ecuación no lineal

Dr. Ramón Carrillo Bastos

Física Computacional

1. Métodos para encontrar raíces

Suponga que se requiere encontrar las raíces de la siguiente ecuación

$$x = 2 - e^{-x}. \tag{1}$$

No existe un método analítico para solucionar esta ecuación, así que usamos métodos computacionales.

1.1. Método de relajación

Hacemos una adiviación para el valor de la variable x, sustituyalo en la mano derecha de la ecuación 1. Por ejemplo tome el valor inicial $x = 1$ y evalue iterativamente (en python) la expresión de ecuación 1 y muestre que se encuentra una solución con precisión deseada (por ejemplo 0.001 %). ¿cuantas iteraciones fueron necesarias para encontrar la precisión buscada? Este método se llama método de relajación.

Cuando el método de relajación funciona, lo hace muy bien y corre razonablemente rápido. El método tiene dos problemas:

1. La ecuación a solucionar debe estar escrita en la forma

   $$x = f(x),$$

   con $f(x)$ una función continua.
   Por ejemplo escriba en esta forma la expresión (use la función exponencial)

   $$\log x + x^2 - 1 = 0. \tag{2}$$

2. La ecuación puede tener más de una solución, así el método solo convergerá a una oslución, ignorando la otra. Uno puede mitigar este problema escogiendo el valor inicial. Sin embargo aún así hay ecuaciones para las que no se puede encontrar soluciones incluso si se está cerca de la solución, por ejemplo tome en la ecuación 2 con el valor inicial $x = 1/2$ y haga una tabla con los valores. ¿Qué observa?

3. Un truco útil puede ser reescribir la ecuación de la siguiente manera

   $$x = \sqrt{1 - log(x)} \tag{3}$$

   aplique el método y haga una tabla con los valores, ¿converge?

4. Existe una razón matemática detras de este comportamiento. Asuma que $x = f(x)$ tiene solución x^*. Usando un desarrollo en serie de Taylor muestre que el método converje si

   $$|f'(x^*)| < 1.$$

5. Suponga que se tiene el caso del inciso anterior. Muestre que si $f(x)$ es invertible se puede reescribir la ecuación y cumplir el criterio.
   El problema es que no todas las funciones son invertibles.

6. Aplique el método para encontrar las soluciones de la ecuación
$$x = x^2 + \sin(2x) \tag{4}$$

7. Considere la ecuación
$$x = 1 - e^{-cx}$$
donde c es un parámetro conocido y x es la variable. Esta ecuación surge en una variedad de situaciones , incluyendo la fisica de procesos de contacto, modelos matemáticos epidemiológicos y la teoría de gráficas aleatorias.

   a) soluciones numéricamente esta ecuación usando el método de relajación para el caso $c = 2$. Use una precisión de al menos 10^{-6}.

   b) Modifique para calcular para $c = 0, 1, 2, 3$ en pasos de 0.01 y haga una gráfica de x como función de c. Deberías de ver una transición de regimen entre $x = 0$ y $x \neq 0$, esto se conoce como trancisión de fase.

8. Sobrerelajación. Reescribimos $x' = f(x)$ de la manera
$$x' = x + \Delta x$$
donde
$$\Delta x = x' - x = f(x) - x.$$
El método de sobrerelajación involucra la iteración de la ecuación modificada
$$x' = x + (1 + \omega)\,\Delta x,$$
si el parámetro ω es cero, entonces es el mismo que el método de relajación, pero si $\omega > 0$ el método toma el valor Δx por el cual x cambiaría y la cambia un poco más. Usando $\Delta x = f(x) - x$, podemos escribir x' como sigue
$$x' = x + (1 + \omega)[f(x) - x] = (1 + \omega) f(x) - \omega x$$
que es como generalmente se escribe. No existe una regla genewral para elegir ω.

   a) soluciones el problema anterior con el método de sobrerelajación para $c = 2$, haga un programa que imprima el valor en cada iteración y compare con el método de relahación. Tome $\omega = 0.5$

   b) Peude serviri usar $\omega < 0$, ¿cuando y porqué?

9. En bioquímica el proceso llamada glicolisis es el rompimiento de la glucosa para genera energía, puede ser modelado con las siguiente ecuaciones
$$\frac{dx}{dt} = -x + ay + x^2 y,$$
$$\frac{dy}{dt} = b - ay - x^2 y.$$
Aquí x y y representan las concetraciones de dos químicos el ADP y el F6P y a yb son constantes positivas. Una de las cracteristicas de estas ecuaciones es que tiene puntos estacionarios, es decir punto en los cuales ambas derivadas se hacen cero de manera simultanea, de tal forma que las cantidades no cambian y se vuelven constantes en el tiempo. Fijando las derivadas a cero, los puntos estacionario de nuestra ecuaciones de glicolisis:

   a) Encuentre soluciones analíticas para los puntos estacionarios.

      1) Muestre que las soluciones del inciso anterior se pueden reescribir de la siguiente manera
$$x = y\left(a + x^2\right)$$
$$y = \frac{b}{a + x^2}$$
Escriba un programa que soluciones estas ecuaciones de manera numérica para $a = 1$ y $b = 2$. (debe mostrar que le program falla en converger)

   b) Reescriba las ecuaciones tal que pueda aplicar el método de convergencia y que la solución coincidad con el resultado analítico.

2. El método de bisección o búsqueda binaria

Sea f una función continua en $[a,b]$ que satisface $f(a)\, f(b) < 0$. Entonces f tiene, necesariamente un cero en (a,b). Por lo pronto supongamos que este cero es único y llamemosle α. La estrategia del método de bisección consiste en cada paso en dividir en dos partes iguales el intervalo dado y seleccionar el subintervalo donde f experimenta un cambio de signo. Concretamente:

1. Sean$I^{(0)} = (a;b)$ e $I^{(k)}$ el subintervalo seleccionado en la etapa k.
2. Elegimos como $I^{(k+1)}$ el subintervalo de $I^{(k)}$ en cuyos extremos f experimenta un cambio de signo. Siguiendo este procedimiento, se garantiza que cada $I^{(k)}$ seleccionado de esta forma contendrá a α.
3. La sucesión $x(k)$, de los puntos medios de estos subintervalos $I^{(k)}$, tenderá a α puesto que la longitud de los subintervalos tiende a cero cuando k tiende a infinito.

Usualmente se define un error máximo o tolerancia y el algoritmo se detiene una vez que el intervalo es menor o igual a este número, o si encuentra el cero antes porque cae en uno de los límites del intervalo.

1. Aplique el método de bisección para encontrar la raíz en la siguiente función

$$f(x) = 2x^2 - 10x + 3 \tag{5}$$

   en el intervalo $[-6,4]$.

   a) primero grafique la función.

   b) despues fije la precisión o tolerancia con 10^{-7}. ¿Cuantas iteraciones necesita su algoritmo?

   c) Ahora modifique el intervalo a $[-2,6]$ y use su algoritmo. ¿Puede encontrar la raíz? discuta porque si encesita haga una gráfica. ¿Cómo se pude mejorar su algoritmo?

2. La constante de Wien. La ley de radiación de Planck nos dice que la intensidad de radiación por unidad de área por unidad de longitud de onda λproducidad por un cuerpo negro a temperatura T es

$$I(\lambda) = \frac{2\pi hc^2\lambda^{-5}}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1}, \tag{6}$$

   donde $h$es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz y k_B es la constante de Boltzmann.

   a) Muestre por diferenciación que la longitud de onda λ a la cual la radiación emitida es mayor es la solución de la ecuación

$$5e^{-hc/\lambda k_B T} + \frac{hc}{\lambda k_B T} - 5 = 0 \tag{7}$$

   haga la sustituación $x = hc/\lambda k_B$ y muestre que la longitud de onda de máxima radiación obedece la ley de desplazamiento de Wien

$$\lambda = \frac{b}{T} \tag{8}$$

   donde la llamada constante de desplazamiento de Wien es $b = hc/k_B x$ y x es la solución de la ecuación

$$5e^{-x} + x - 5 = 0 \tag{9}$$

   1) Escriba un programa que soluciones esta ecuación con precisión de $\epsilon = 10^{-6}$ usando el método de bisección.
   2) Compare este resultado con el obtenido con un método de relajación.
   3) La ley de desplazamiento de Wien es la base para el método de pirometría óptica, un método para medir temperaturas de objetod observando el color de la radiación térmica que emiten. EL método es común para estimar la temperatura superifcial de cuerpos astronomicos, como el Sol. La longitud de onda de misión máxima para el sol es $\lambda = 502\,\text{nm}$. De las ecuaciones anteriores y con tu valor de la constante de desplzamiento, estime la temperatura de la superficie del Sol.

3. Considere un potencial cuadrado de ancho w con paredes de potencial V. Usando la ecuación de Schrödinger se puede mostrar que las soluciones para las energías permitidas para una partícula de masa m están dadas por

$$\tan\sqrt{w^2mE/2\hbar^2} = \begin{cases} \sqrt{(V-E)/E} & \textit{estado pares} \\ -\sqrt{E/(V-E)} & \textit{estado impar} \end{cases}$$

Los estados se empiezan a numerar desde el 0, es decir el estado base es el 0.

a) Para un electrón de masa $\left(m = 9.1094 \times 10^{-31}\right)$ en un potencial con $V = 20\,\text{eV}$ y $w = 1\,\text{nm}$, grafique las siguiente cantidades

$$y_1 = \tan\sqrt{w^2mE/2\hbar^2}$$
$$y_2 = \sqrt{(V-E)/E}$$
$$y_3 = -\sqrt{E/(V-E)}$$

en la misma gráfica. como función de E desde $E = 0$ a $E = 30\,\text{eV}$. De su gráfica haga una aproximación de la energía para el sexto nivel de la partícula.

b) Ecnuentre las primeras 6 energías usando el método de búsqueda binaria con una precisión de $0.001\,\text{eV}$.