

COMPUTACION II

PRÁCTICA 6 (1 evaluable)

Ecuaciones no lineales

1. Construya una aproximación de $\sqrt{2}$ utilizando el método iterativo de Newton-Raphson sobre papel. Utilice la función $f(x) = (x^2-2)$ y busque numéricamente su cero con la fórmula del método sin ningún recurso tecnológico más que el lápiz y calculadora no científica. Estudie la convergencia, es decir el número n de iteraciones, para llegar a una precisión de 10^{-6} . Compruebe visualmente tu resultado.
2. Repita lo mismo del ejercicio 1 (es decir con lápiz y papel) para el polinomio $p(x) = 4x^3-2x^2+3$ que posee una raíz en el intervalo $[-2,1]$. Se pide aproximarla utilizando el método Newton-Raphson. Utilice $x_0 = -1$. Compruebe visualmente tu resultado.
3. El potencial de Buckingham es una representación aproximada de la energía potencial de interacción entre átomos de un sólido o un gas, en función de la distancia entre ellos, y viene dado por la siguiente expresión:

$$V(r) = V_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 - \exp\left(\frac{-r}{\sigma} \right) \right]$$

Este potencial contiene dos términos, uno positivo, correspondiente a una fuerza repulsiva de corto alcance entre átomos, y un segundo término, negativo, que corresponde a una fuerza atractiva de largo alcance. Existe un punto intermedio en el que el potencial alcanza un mínimo, donde se compensan las dos fuerzas. Entonces:

- a) Grafique $V(r)$ con su programa de dibujo preferido y adjúntelo a la entrega. Decida los valores iniciales en función a lo que ves.
- b) Calcular el valor de esta distancia usando para ello 3 métodos numéricos: **bisección**, **secante** y **Newton**. Tómese como valor de $\sigma = 1$ nm.
- c) Compara, en una gráfica que lea de un fichero de salida, los resultados de los tres métodos en función del número de iteraciones variando la precisión de 10^{-3} a 10^{-12} . Discute en un pequeño texto los resultados.