



Solución de ecuaciones no lineales

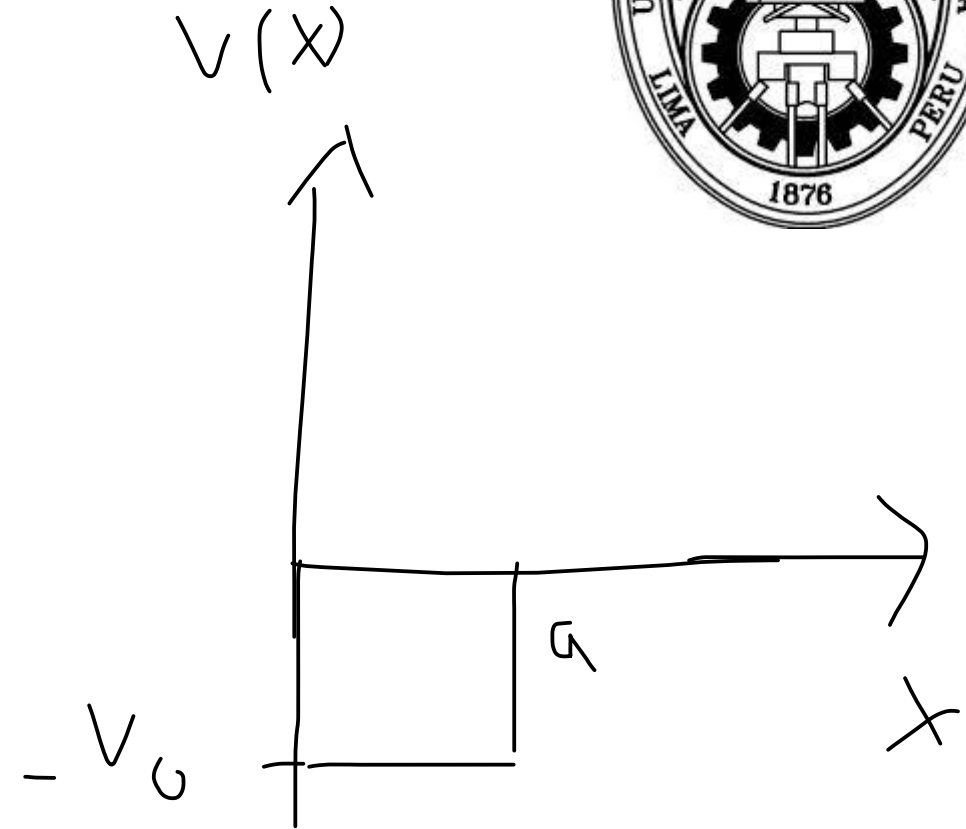
PhD. Alejandro Paredes



Ecuación de Shrödinger 1D estacionaria

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x),$$

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 \leq x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$



$U(x)$: función de onda

Consideramos sólo estados ligados para $E < 0$



Ecuación de Shrödinger 1D estacionaria

Condiciones de frontera:

$u(x)$ y $u'(x)$ se anulan en el infinito

Condiciones de continuidad:

$u(x)$ y $u'(x)$ son continuas en $x=a$

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E) u(x) = 0 \quad x < a, \quad u(x) = A \sin(\sqrt{2m(V_0 - |E|)}x/\hbar)$$

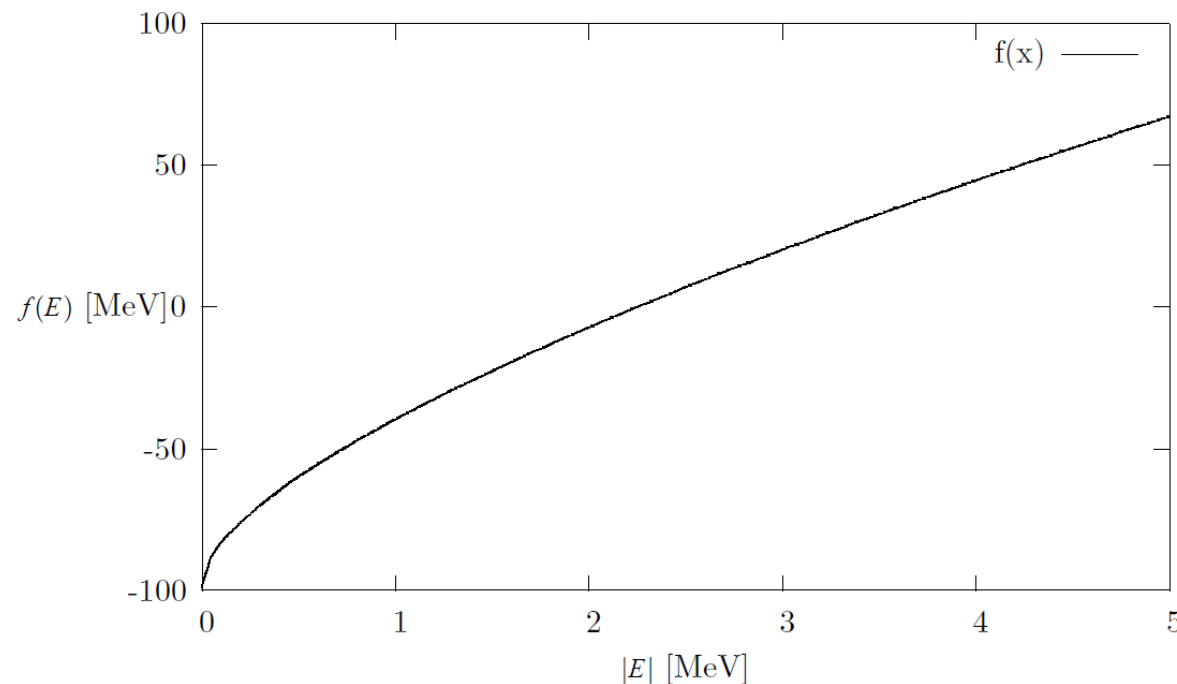
$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E u(x) = 0 \quad x > a. \quad u(x) = B \exp(-\sqrt{2m|E|}x/\hbar)$$

$$\sqrt{2m(V_0 - |E|)} \cot(\sqrt{2ma^2(V_0 - |E|)}/\hbar) = -\sqrt{2m|E|}.$$



Ecuación de Shrödinger 1D estacionaria

$$f(E) = \sqrt{2m(V_0 - |E|)} \cot(\sqrt{2ma^2(V_0 - |E|)/\hbar}) + \sqrt{2m|E|}.$$

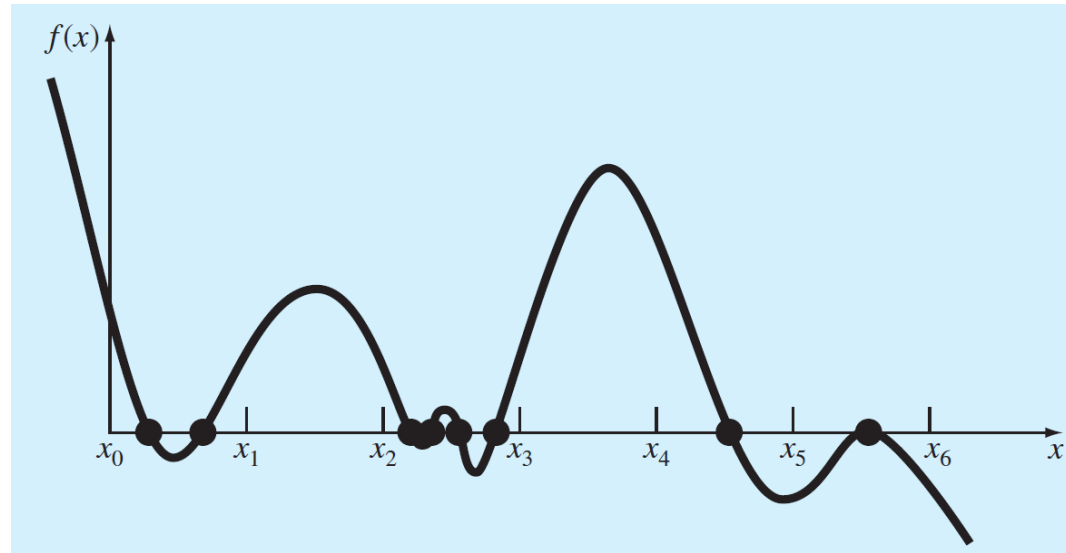


El problemas se reduce a encontrar la raíz de una función.

$V_0 = 20$ MeV, $a = 2$ fm, $m = 938$ Mev

$E \approx 2,2$ MeV

Métodos iterativos



Bracketing methods:

- Acotan la raíz.
- Necesitan dos estimaciones iniciales a los lados de la raíz buscada.
- Ejemplos: búsqueda incremental, bisección, falsa posición, etc.

Open methods:

- Pueden necesitar dos o mas estimaciones.
- No acotan la raíz.
- Ejemplos: Newton-Raphson, secante, Broydens, etc

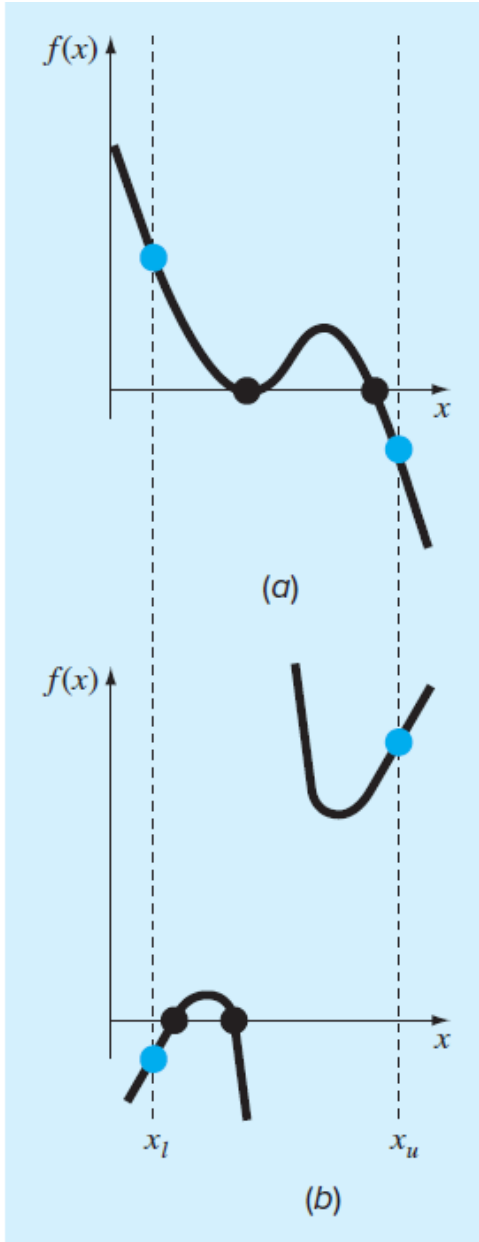


Bracketing Methods

Búsqueda incremental

Si tenemos una función continua $f(x)$, entonces podemos afirmar que

$$f(x_l) \times f(x_u) < 0$$





Búsqueda incremental

Descripción del método

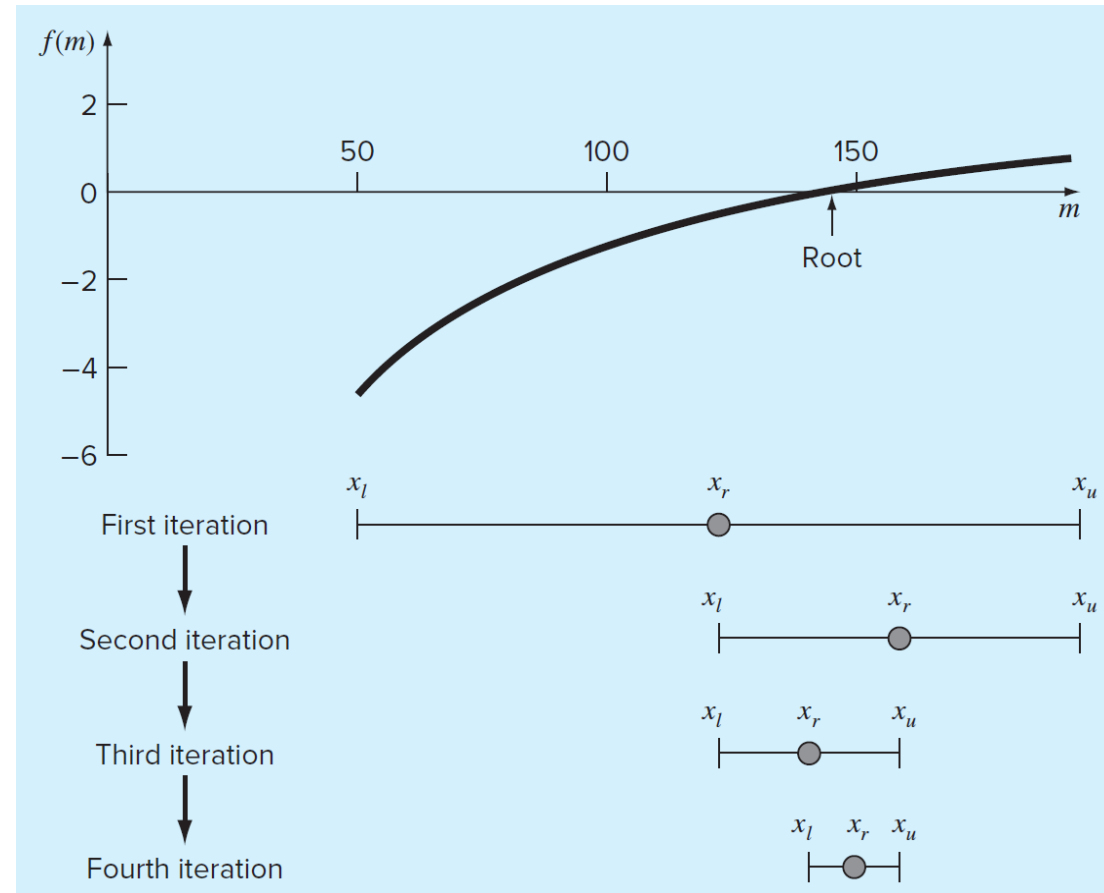
- Elija un punto inicial x_0 y un tamaño de paso Δx . Use un Δx positivo si desea buscar a la derecha, y uno negativo si desea buscar a la izquierda.
- Hacemos $x_1 = x_0 + \Delta x$ y calcule $f(x_0)$ y $f(x_1)$.
- Si $f(x_0) \times f(x_1) < 0$, se supone que existe al menos una raíz en el intervalo (x_0, x_1) .
- Si el signo de f no cambia entre x_0 y x_1 , hacemos $x_2 = x_1 + \Delta x$ y repita el proceso.

Método de la bisección:

- Variante del método de búsqueda incremental.
- En cada iteración el intervalo se divide por la mitad.
- Convergencia lenta
- Dado un intervalo inicial $\epsilon_0 = x_{0u} - x_{0l}$ y fijado un intervalo de tolerancia (error deseado) ϵ_n , luego de

$$n = \log_2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon_n}$$

iteraciones el método converge.





Método de la bisección: Algoritmo

Step 1: Choose lower x_l and upper x_u guesses for the root such that the function changes sign over the interval. This can be checked by ensuring that $f(x_l)f(x_u) < 0$.

Step 2: An estimate of the root x_r is determined by

$$x_r = \frac{x_l + x_u}{2}$$

Step 3: Make the following evaluations to determine in which subinterval the root lies:

- (a) If $f(x_l)f(x_r) < 0$, the root lies in the lower subinterval. Therefore, set $x_u = x_r$ and return to step 2.
- (b) If $f(x_l)f(x_r) > 0$, the root lies in the upper subinterval. Therefore, set $x_l = x_r$ and return to step 2.
- (c) If $f(x_l)f(x_r) = 0$, the root equals x_r ; terminate the computation.

Método de la bisección: Pseudo código

```
FUNCTION Bisect(xl, xu, es, imax, xr, iter, ea)
```

```
  iter = 0
```

```
  DO
```

```
    xrold = xr
```

```
    xr = (xl + xu) / 2
```

```
    iter = iter + 1
```

```
    IF xr ≠ 0 THEN
```

```
      ea = ABS((xr - xrold) / xr) * 100
```

```
    END IF
```

```
    test = f(xl) * f(xr)
```

```
    IF test < 0 THEN
```

```
      xu = xr
```

```
    ELSE IF test > 0 THEN
```

```
      xl = xr
```

```
    ELSE
```

```
      ea = 0
```

```
    END IF
```

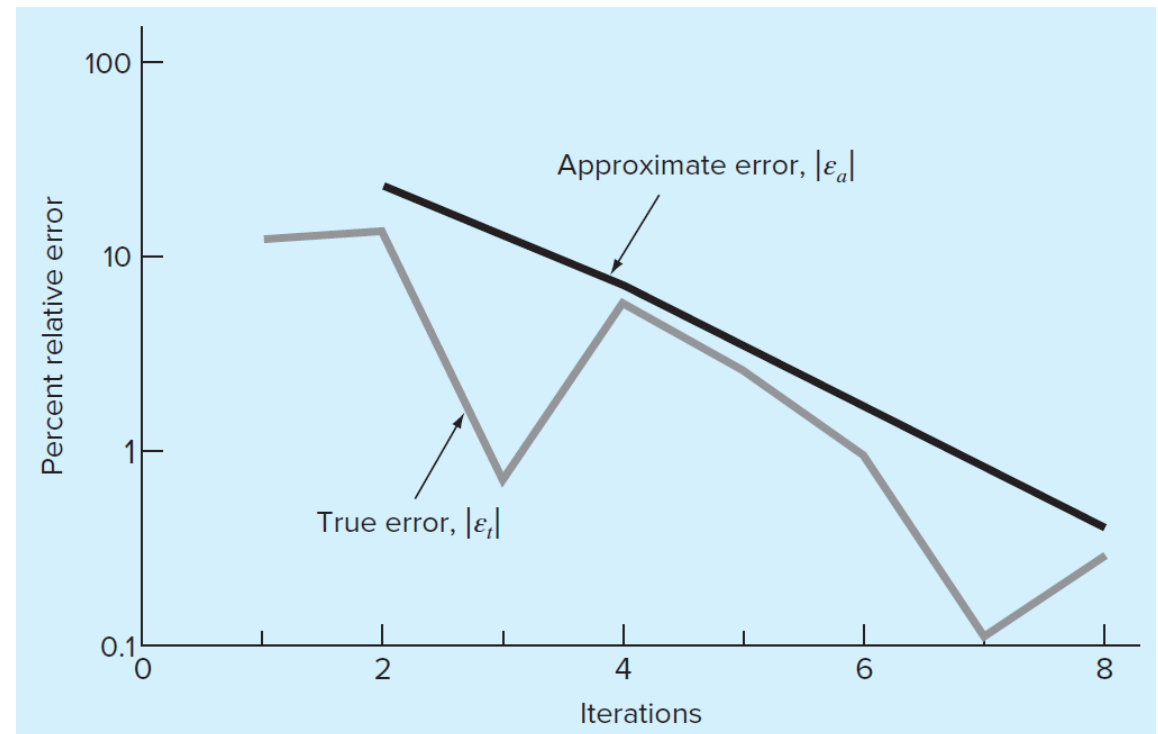
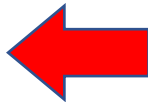
```
    IF ea < es OR iter ≥ imax EXIT
```

```
  END DO
```

```
  Bisect = xr
```

```
END Bisect
```

$$|\varepsilon_a| = \left| \frac{x_r^{\text{new}} - x_r^{\text{old}}}{x_r^{\text{new}}} \right| 100\% \quad \varepsilon_t = \frac{\text{true value} - \text{approximation}}{\text{true value}} 100\%$$

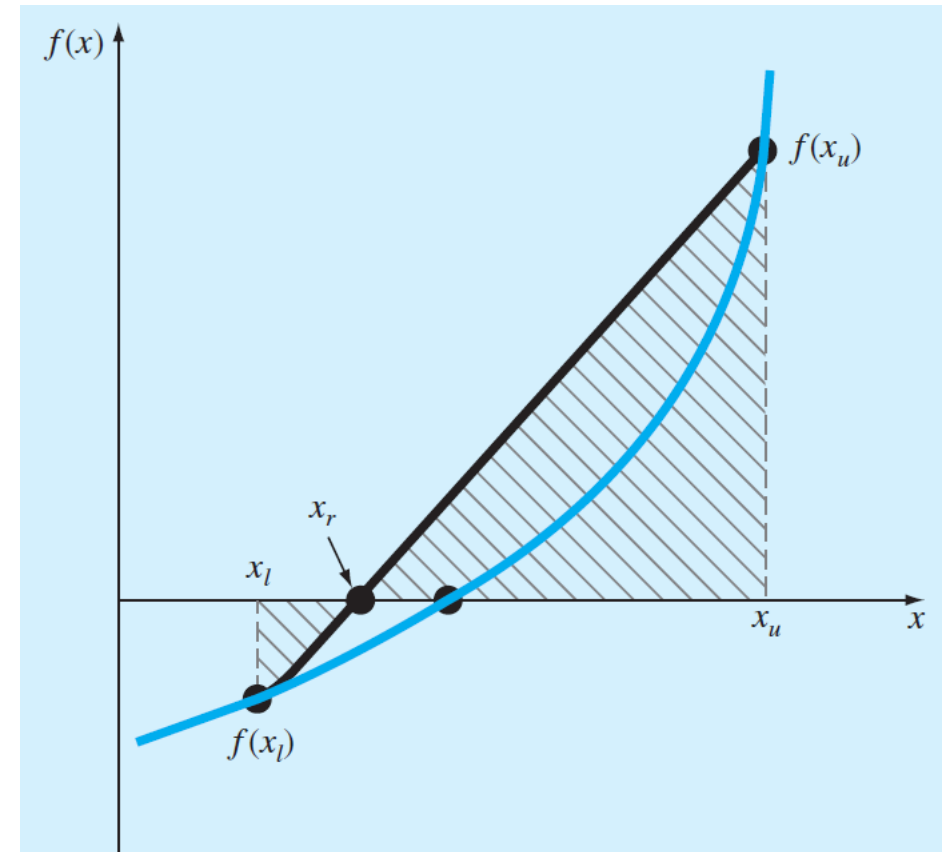


Método falsa posición

- Llamado método de interpolación lineal.
- Para funciones suaves cerca de la raíz, converge más rápido que el método de la bisección.
- **Las pendientes de los triángulos son iguales.**
- La intersección con el eje x es una estimación de la raíz buscada.
- Mismo algoritmo que método de la bisección.

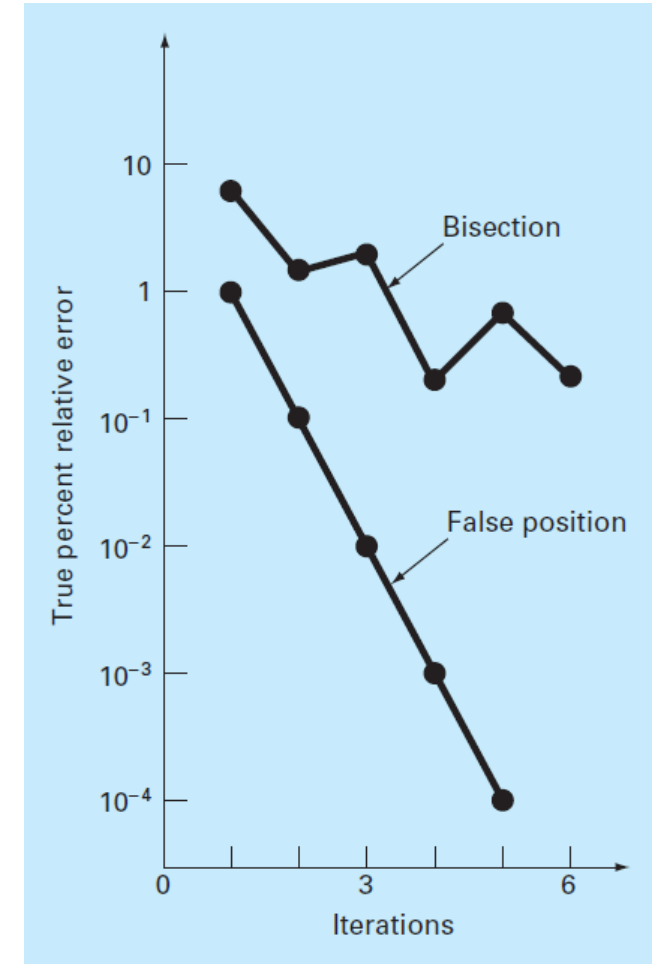
$$x_r = x_u - \frac{f(x_u)(x_l - x_u)}{f(x_l) - f(x_u)}$$

solo el valor x_r es modificado en el algoritmo.



Falsa posición vs bisección

- Error en método de la falsa posición decrece más rápido que para el caso del método de la bisección.
- En cada iteración el intervalo para el método de la bisección se reduce a la mitad.





Open
Methods



Método punto fijo

- Sustitución sucesiva.
- Se reordena la ecuación de tal manera que la variable x siempre aparezca a la izquierda

$$x = g(x) \text{ -----> } x_{i+1} = g(x_i)$$

Ejemplo:

$$\begin{array}{lll} x^2 - 2x + 3 = 0 & \text{----->} & x = (x^2 + 3)/2 & \text{----->} & x_{i+1} = x_{i+1}^2 \\ \sin(x) = 0 & \text{----->} & x = \sin(x) + x & \text{----->} & x_{i+1} = \sin(x_i) + x_i \end{array}$$

Método punto fijo

Criterio de convergencia: $|g'(x)| < 1$

$$g(x_i) - g(x_{i-1}) = g'(\varepsilon_i)(x_i - x_{i-1}), \quad \varepsilon_i \in [x_i, x_{i-1}]$$

$$|x_{i+1} - x_i| = |g'(\varepsilon_i)| |x_i - x_{i-1}|, \quad \varepsilon_i \in [x_i, x_{i-1}]$$

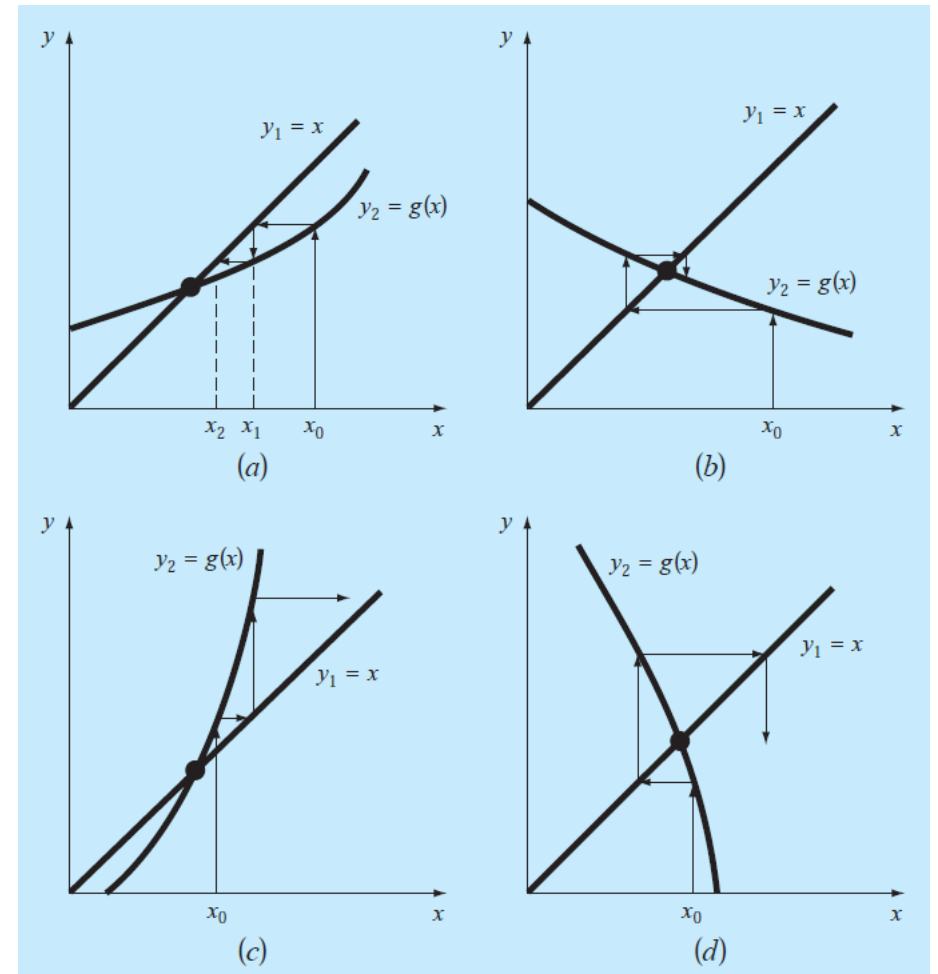
para todo $i=0, \dots, n$

Suponiendo que $|g'(x)| \leq M$

$$|x_{i+1} - x_i| \leq M |x_i - x_{i-1}| \text{ para todo } i=0, \dots, n$$

$$|x_{i+1} - x_i| \leq M^i |x_1 - x_0| \text{ para todo } i=0, \dots, n$$

$M < 1$ Es condición suficiente, pero no necesaria para la convergencia.





Método punto fijo

$$|\varepsilon_a| = \left| \frac{x_r^{\text{new}} - x_r^{\text{old}}}{x_r^{\text{new}}} \right| 100\%$$

Convergencia lineal

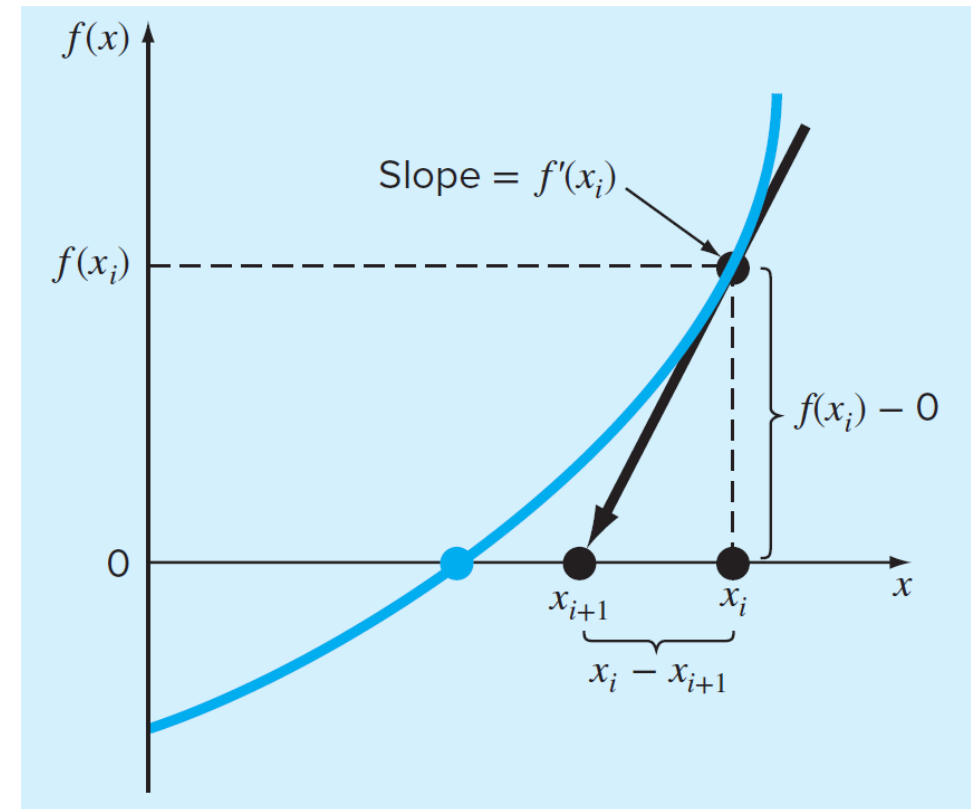
$$\varepsilon_i = a\varepsilon_{i-1}$$

```
FUNCTION Fixpt(x0, es, imax, iter, ea)
  xr = x0
  iter = 0
  DO
    xold = xr
    xr = g(xold)
    iter = iter + 1
    IF xr ≠ 0 THEN
      ea =  $\left| \frac{xr - xold}{xr} \right| \cdot 100$ 
    END IF
    IF ea < es OR iter ≥ imax EXIT
  END DO
  Fixpt = xr
END Fixpt
```

Método Newton Raphson

- Necesita evaluación de la función f y de su derivada en puntos arbitrarios.
- Recomendable cuando sea fácil obtener la derivada de f .
- Si la función no es suave se desaconseja su uso.
- Estimación inicial : x_i
- Se prolonga la tangente que pasa por el punto $(x_i, f(x_i))$ y se obtiene x_{i+1} .
- x_{i+1} es una mejor estimación de la raíz.

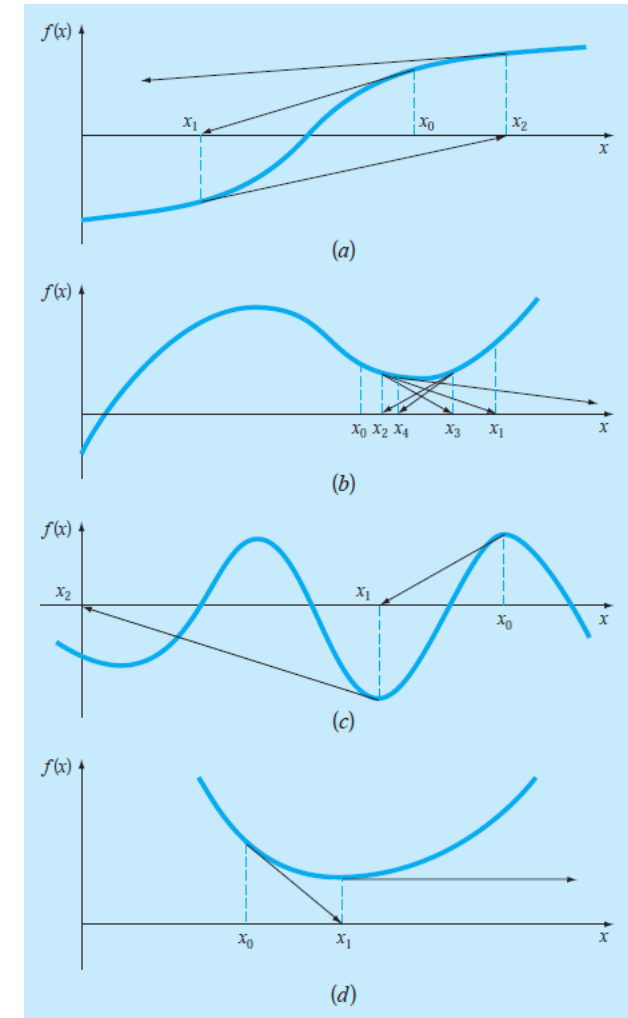
$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - 0}{x_i - x_{i+1}} \quad x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$



Método Newton Raphson: Convergencia

- Convergencia cuadrática:
Error proporcional al cuadrado del error precedente
- No recomendable con problemas de raíces múltiples.

$$E_{t,i+1} = \frac{-f''(x_r)}{2f'(x_r)} E_{t,i}^2$$

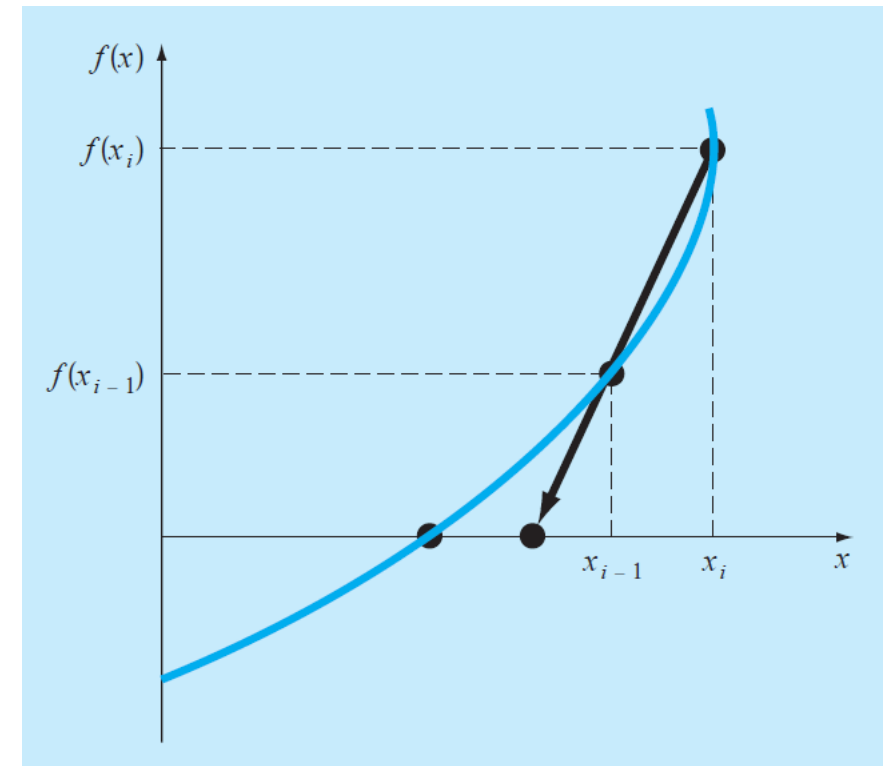


Método de la secante

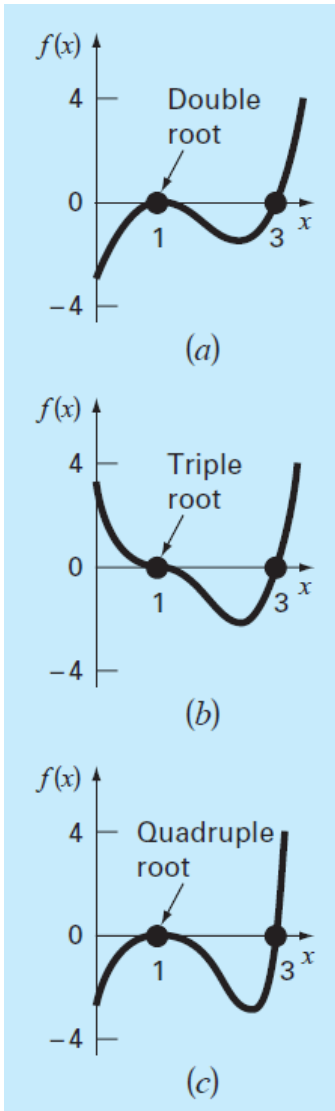
Método de Newton-Raphson con aproximación backward para la derivada

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i}$$

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_{i-1} - x_i)}{f(x_{i-1}) - f(x_i)}$$



Raíces múltiples



- Raíces de multiplicidad impar: cruzan el eje x.
- Raíces de multiplicidad par: la función no cambia de signo.
- La derivada de $f(x)$ puede ser cero en la raíz.
- Newton Raphson y la Secante convergen linealmente.
- $f(x)$ se anula antes que $f'(x)$

$$u(x) = \frac{f(x)}{f'(x)}$$

$$u'(x) = \frac{f'(x)f'(x) - f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$$

Newton-Raphson modificado

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)f'(x_i)}{[f'(x_i)]^2 - f(x_i)f''(x_i)}$$

Secante modificado

$$x_{i+1} = x_i - \frac{u(x_i)(x_{i-1} - x_i)}{u(x_{i-1}) - u(x_i)}$$



Conclusiones

- Todos los métodos estudiados solo pueden encontrar raíces reales.
- Algunos métodos no pueden encontrar la raíces de funciones que son tangentes al eje x.

Constante de desplazamiento Wien



La ley de radiación de Planck nos dice que la intensidad de radiación
Por unidad de área por unidad de longitud de onda de un cuerpo
Negro a una temperatura T es:

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

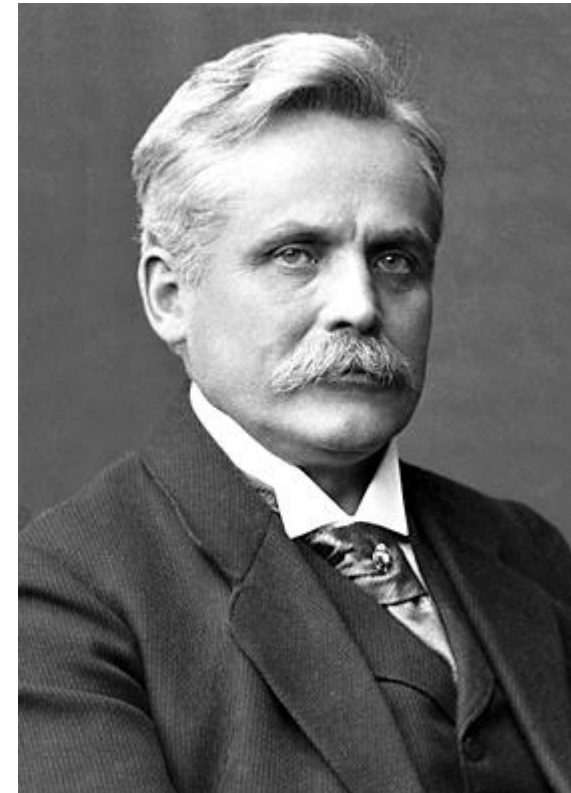
A) Muestre que la longitud de onda λ para la cual $I(\lambda)$ es máxima
verifica la ecuación

$$5e^{-x} + x - 5 = 0, \quad x = hc/\lambda k_B T$$

donde se puede identificar la ley de desplazamiento de Wien

$$\lambda = \frac{b}{T}; \quad b = hc/k_B x$$

b es llamada la constante de desplazamiento de Wien



Constante de desplazamiento Wien



- B) Escriba un programa que determine el valor de b con una precisión de $\epsilon = 10^{-6}$. Use diferentes métodos.
- C) Haga un gráfico en el que se observe la evolución del error (disminución) con respecto al número de iteraciones. Decida a partir de este gráfico cuál es el mejor método.

