

# Computación científica LF-214

Profesor: Julio C. Marín

Departamento de Meteorología, Universidad de Valparaíso

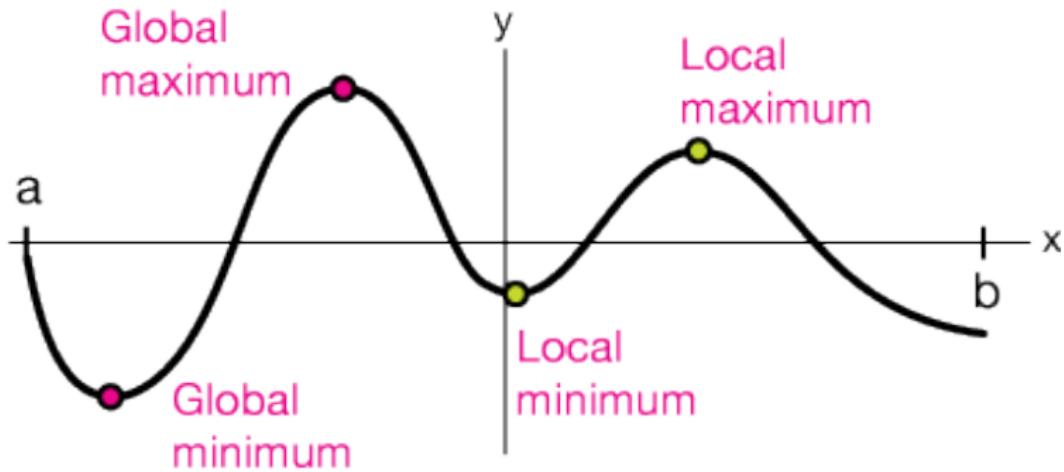
Primer Semestre

# Temas de la clase

- Máximo y mínimo de una función
- Ejemplos y ejercicios

- Problema de encontrar mínimos y máximos de funciones está muy relacionado al problema de encontrar las soluciones de  $f(x) = 0$
- En física se encuentran varios problemas donde debe encontrarse el mínimo de funciones:
  - Solución de problemas de equilibrio: Por ejemplo, hallar el mínimo de E. potencial
  - En la solución de problemas de mecánica cuántica
- Una función puede tener más de un mínimo o máximo
- Hay que destacar entre mínimo/máximo local o global

# Máximos y mínimos de funciones

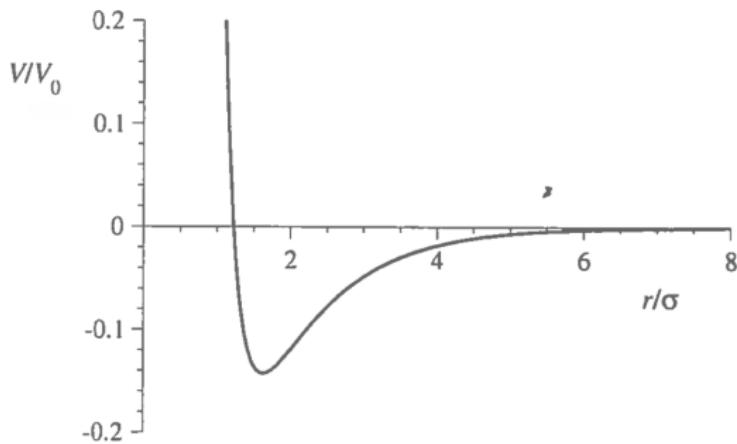


## Ejemplo 6.5: Potencial de Buckingham

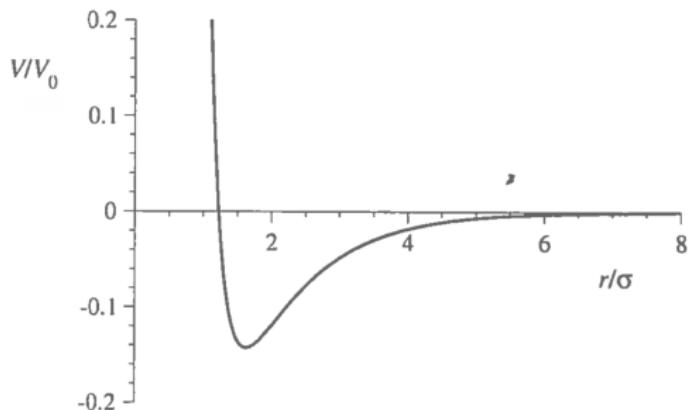
- El potencial de Buckingham es una representación aproximada de la energía potencial de interacción entre átomos en un sólido o gas en función de la distancia  $r$  entre ellos:

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

Un gráfico del potencial en función de  $r/\sigma$  sería:



## Ejemplo 6.5: Potencial de Buckingham



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

- Potencial contiene un término + (Fuerza repulsiva entre átomos) y un término - (Fuerza atractiva).
- Las dos fuerzas están en balance en valor mín. de potencial
- Corresponde a la distancia de reposo entre átomos
- No hay expresión analítica para calcular esta distancia. Hay que usar métodos numéricos

# Ejemplo 6.5: Potencial de Buckingham

Cómo calcular el mínimo de potencial?

Usamos función fmin de scipy

- import numpy as np
- from scipy.optimize import fmin
- sigma = 1.0
- def f(r):
  - return (sigma/r)\*\*6 - np.exp(-r/sigma)
- fumin = fmin(f, 1)
- print(fumin)

## Ejemplo: Encontrar máximo de función con fmin

Encontrar máximo de función:

$$-x^2 + 4x - 2$$

# Ejemplo: Encontrar máximo de función con fmin

Encontrar máximo de función:

$$-x^2 + 4x - 2$$

- import numpy as np
- from scipy.optimize import fmin
- def f(x):
  - return  $-(-x^{**2} + 4*x - 2)$
  -
- fumax = fmin(f, 1)
- print("Valor max. de f(x) = ", fumax)
- 
- xx = np.arange(-5.0, 5.1, 0.1)
- plt.clf(); plt.plot(xx, -f(xx),'-k')
- plt.ylim(-10,3); plt.grid()
- plt.hlines(0, -5.0, 5.0, colors='k')

# Ejemplo: Mínimo global o local

Ejemplo: Encontrar el valor mínimo global y local de la función  
 $f(x) = x^2 + 10 \sin(x)$

## Ejemplo: Mínimo global o local

Ejemplo: Encontrar el valor mínimo global y local de la función  
 $f(x) = x^2 + 10 \sin(x)$

```
import numpy as np
from scipy.optimize import fsolve, fminbound

x = np.arange(-10, 10, 0.1)
def f(x):
    return x**2 + 10*np.sin(x)
plt.clf(); plt.plot(x, f(x), '-b')
plt.ylabel('F(x)'); plt.xlabel('X'); plt.hlines(0, -10, 10, colors='k')
# Valor inicial
x0 = -10
# Mínimo local con fmin
fmini = fmin(f, x0); print("Min. function = ", fmini); print()
# Mínimo local con fminbound
rmini = fminbound(f, -10, 0); print("Min. function = ", rmini)
```