

Computación científica LF-214

Profesor: Julio C. Marín

Departamento de Meteorología, Universidad de Valparaíso

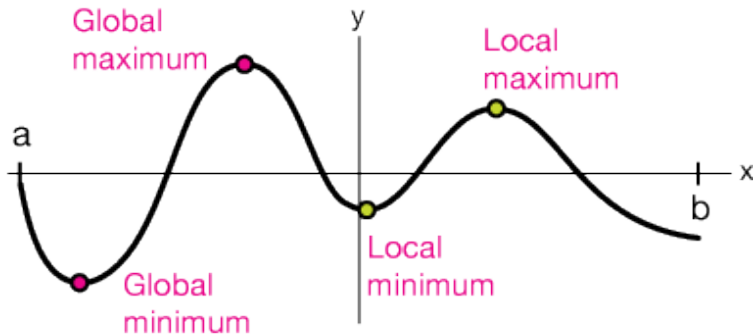
Primer Semestre

- Máximo y mínimo de una función
- Ejemplos y ejercicios

Máximos y mínimos de funciones

- 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

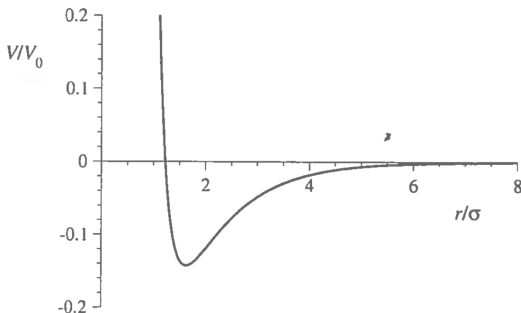


Ejemplo 6.5: Potencial de Buckingham

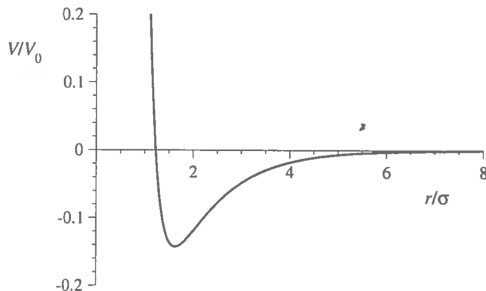
- El potencial de Buckingham es una representación aproximada de la energía potencial de interacción entre átomos en un sólido o gas en función de la distancia r entre ellos:

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

Un gráfico del potencial en función de r/σ 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)
```