

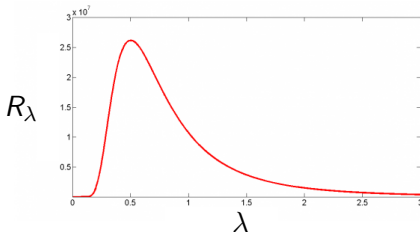
Raíces de funciones con una variable

Marco V. Bayas

Noviembre 10, 2022

Ecuaciones no lineales en física

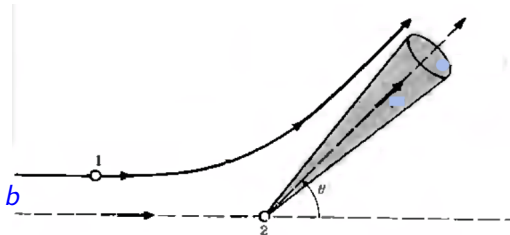
Máximo de la distribución de Planck



$$(x - 5)e^x + 5 = 0$$

$$x = \frac{hc}{k_B T} \frac{1}{\lambda}$$

Distancia mínima en un proceso de dispersión con un potencial central



$$1 - \frac{1}{x^2} - v(x) = 0$$

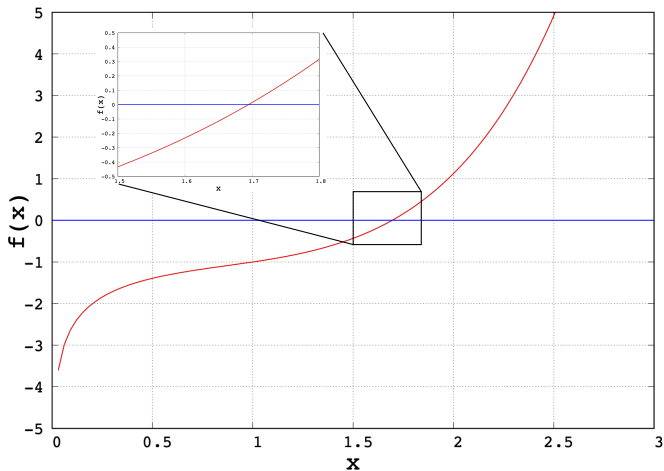
$$x = \frac{r}{b}$$

$$v(x) = \frac{V(bx)}{E}$$

Exploración gráfica

Función:

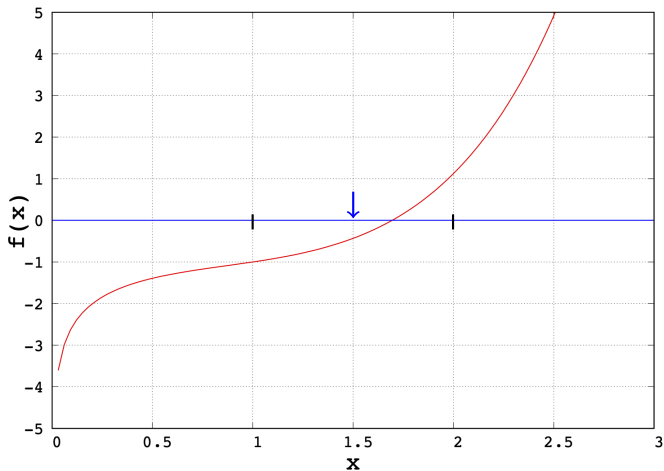
$$f(x) = e^x \ln x - x^2$$



Método de la Bisección

Función:

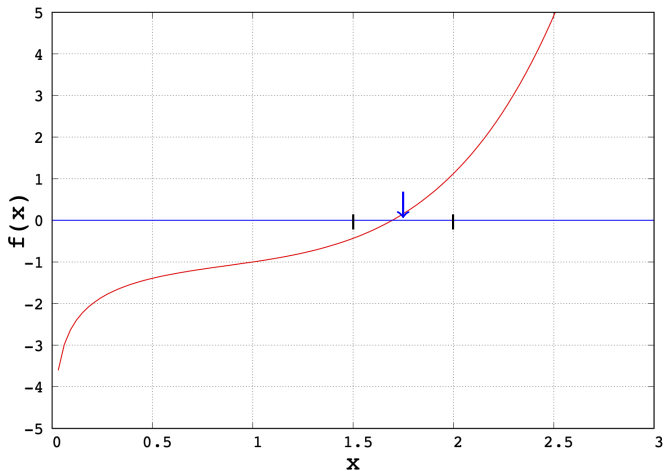
$$f(x) = e^x \ln x - x^2$$



Método de la Bisección

Función:

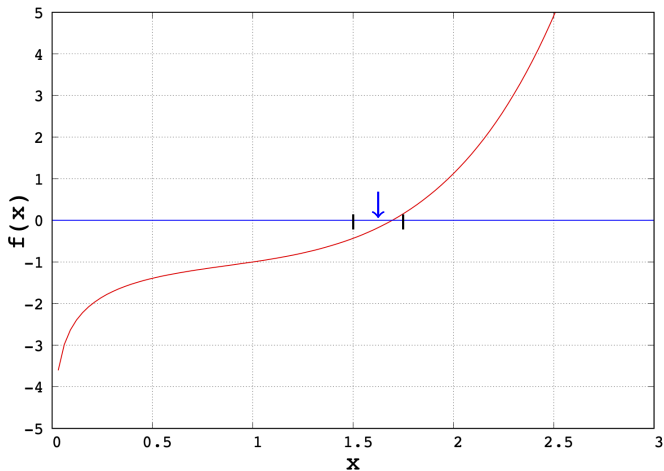
$$f(x) = e^x \ln x - x^2$$



Método de la Bisección

Función:

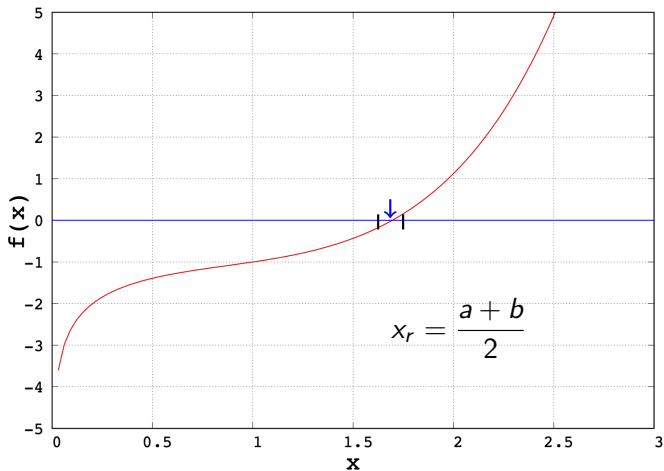
$$f(x) = e^x \ln x - x^2$$



Método de la Bisección

Función:

$$f(x) = e^x \ln x - x^2$$



Método de la Bisección

Algoritmo

Requerimientos:

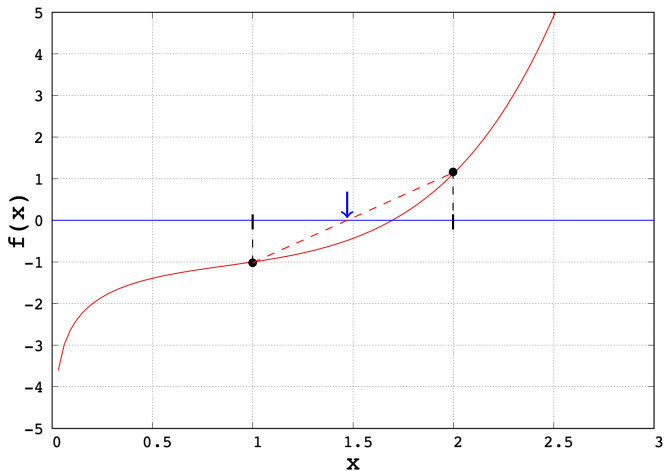
- $f(x)$
- Intervalo $[a, b]$ tal que $f(a) * f(b) < 0$
- El intervalo $[a, b]$ debe contener una sola raíz

1. Definir el intervalo inicial: $[a, b]$ y la tolerancia δ
2. Evaluar $f(a)$ y $f(b)$
3. Evaluar $x_r = \frac{a+b}{2}$
4. Actualizar el intervalo $[a, b]$
 - ▶ Evaluar $f(x_r)$
 - ▶ Si $f(x_r) * f(a) < 0$, entonces $b = x_r$, caso contrario $a = x_r$
5. Repetir los pasos 3 y 4 hasta que $|a - b| < \delta$

Método de la Secante

Función:

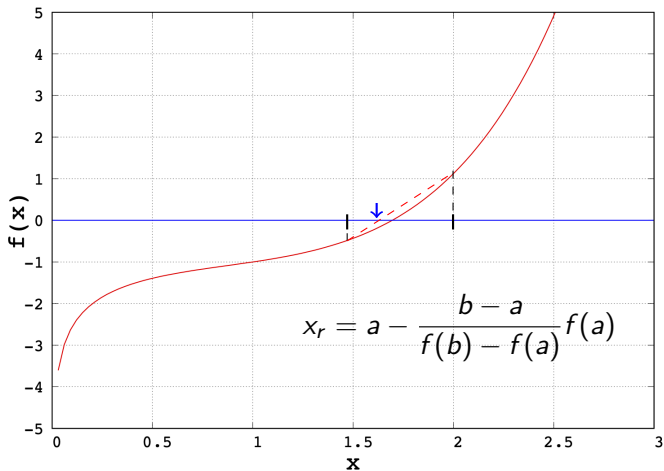
$$f(x) = e^x \ln x - x^2$$



Método de la Secante

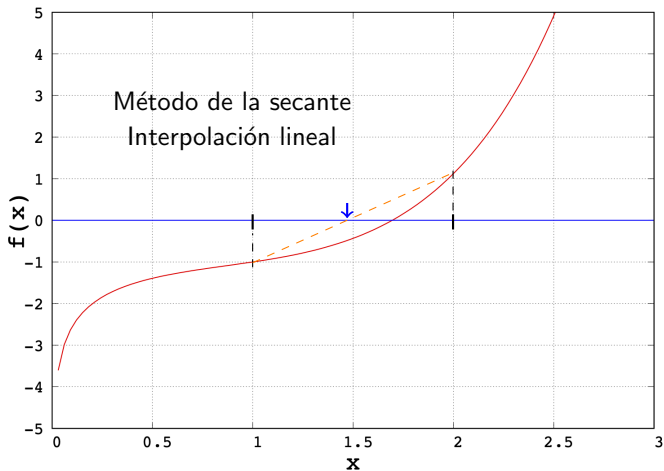
Función:

$$f(x) = e^x \ln x - x^2$$



Método de Van Wijngaarden-Dekker-Brent

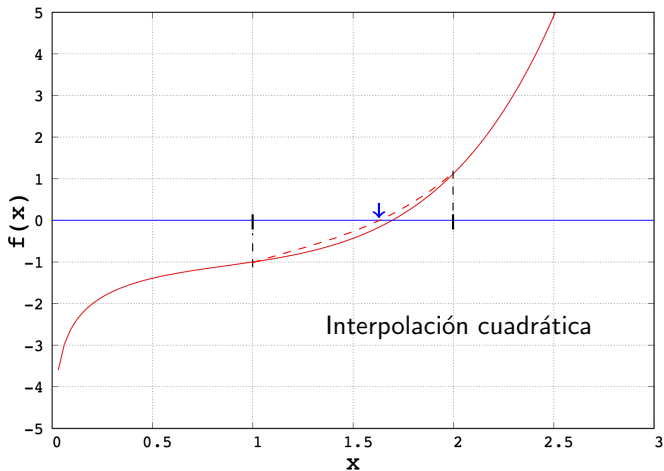
Función: $f(x) = e^x \ln x - x^2$



Método de Van Wijngaarden-Dekker-Brent

Función:

$$f(x) = e^x \ln x - x^2$$



Método de Van Wijngaarden-Dekker-Brent

Estimación de la raíz:

Dados tres valores de x : a , b , y c

$$x_r = b + \frac{P}{Q}$$

Donde:

$$P = \frac{f(b)}{f(a)} \left[\frac{f(a)}{f(c)} \left(\frac{f(b)}{f(c)} - \frac{f(a)}{f(c)} \right) (c - b) - \left(1 - \frac{f(b)}{f(c)} \right) (b - a) \right]$$

$$Q = \left(\frac{f(a)}{f(c)} - 1 \right) \left(\frac{f(b)}{f(c)} - 1 \right) \left(\frac{f(b)}{f(a)} - 1 \right)$$

Demostración ?

Método de Newton-Raphson

Sea una función $f(x)$, continua y derivable

$$\rightarrow f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

Si $f(x)$ tiene una raíz x_r en la vecindad de x_0 , entonces:

$$f(x_r) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x_r - x_0) \approx 0$$

$$\rightarrow x_r \approx x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

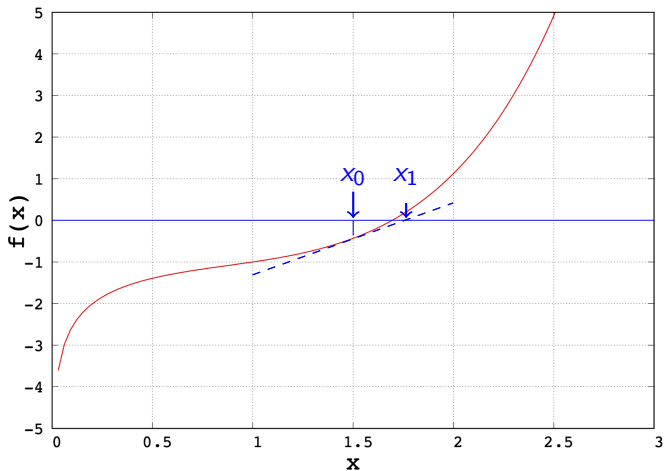
La estimación puede mejorarse si se procede iterativamente

$$x_{k+1} \approx x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

Método de Newton-Raphson

Función:

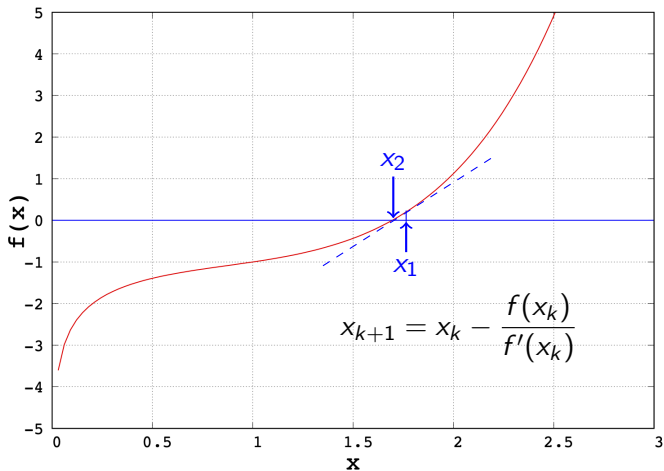
$$f(x) = e^x \ln x - x^2$$



Método de Newton-Raphson

Función:

$$f(x) = e^x \ln x - x^2$$



Método de Newton-Raphson

Algoritmo

Requerimientos:

- $f(x)$ y $f'(x)$
- Estimación inicial x_0

1. Definir la estimación inicial: x_0 y la tolerancia δ
2. Para cada valor de $k \geq 0$, evaluar:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

3. Repetir el paso 2 hasta que $|x_{k+1} - x_k| < \delta$

Método de Newton-Raphson

Cálculo numérico de la derivada

Esquema iterativo:
$$x_{k+1} \approx x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

Aproximación:

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$$

$$\longrightarrow x_{k+1} \approx x_k - \underbrace{\frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})} f(x_k)}_{\text{Método de la secante}}$$

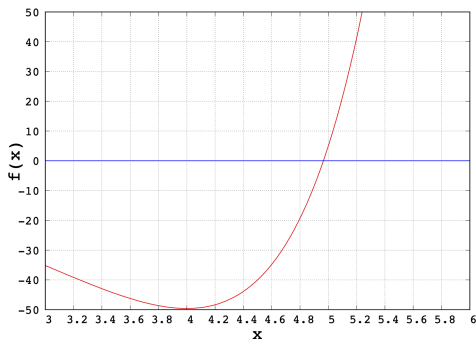
Ejercicio

Calcular numéricamente el valor de la constante b en la ley de desplazamiento de Wein

$$\lambda_{max} = \frac{b}{T}$$

Sol: El máximo de la distribución de Planck esta determinado por la ecuación no lineal:

$$(x - 5)e^x + 5 = 0 \quad \text{con} \quad x = \frac{hc}{k_B T} \frac{1}{\lambda}$$



Raíz de la función:

Método: Newton Raphson

Iteración	Raíz
0	4.5
1	5.38891
2	5.09246
3	4.97971
4	4.96533
5	4.96511
6	4.96511

$$\rightarrow b = \frac{hc}{4.96511 k_B} \approx 2900 \mu m K$$