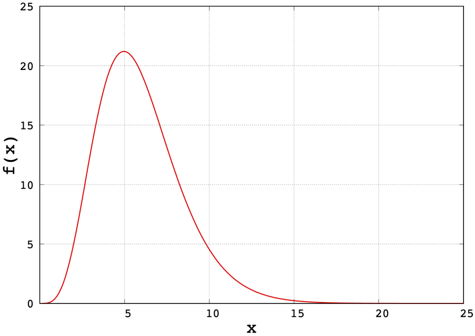
Extremos de una función

Marco V. Bayas

Noviembre 18, 2022

Problemas de extremos en física

Máximo de la distribución de Planck



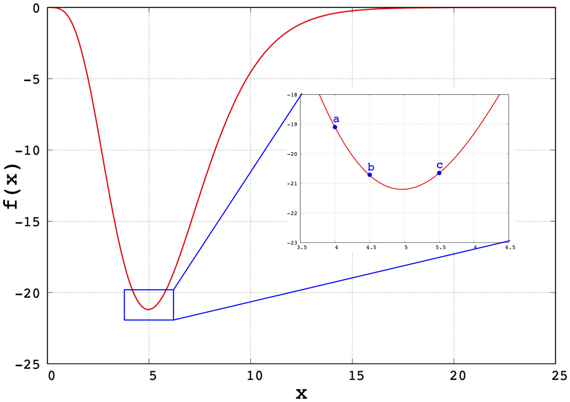
$$f(x) = \frac{x^5}{e^x - 1}$$

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

Identificación del intervalo

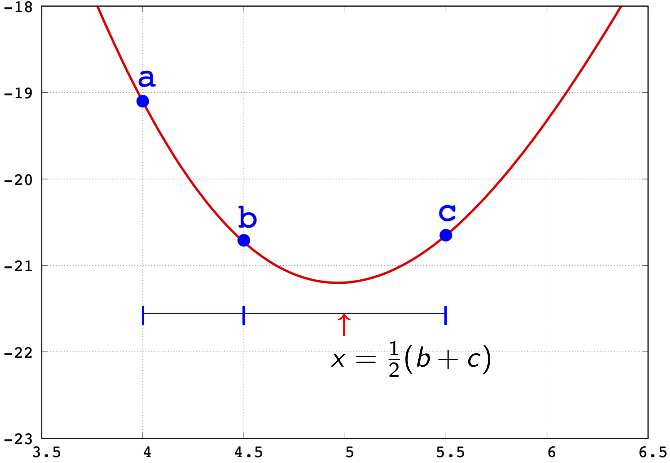
La búsqueda de extremos puede reducirse a la búsqueda de mínimos

Función: $$f(x) = \frac{-x^5}{e^x - 1}$$



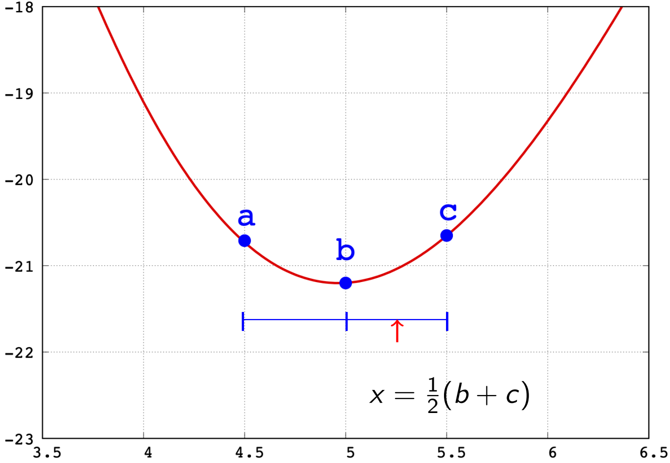
Bisección

Función: $$f(x) = \frac{-x^5}{e^x - 1}$$

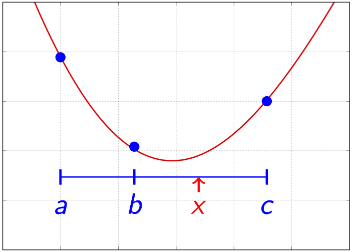


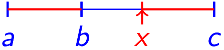
Bisección

Función: $$f(x) = \frac{-x^5}{e^x - 1}$$



Sección "dorada"





$$\frac{b-a}{c-a} = \frac{x-b}{x-a} = w$$

$$\frac{x-a}{c-a} = 1 - w$$

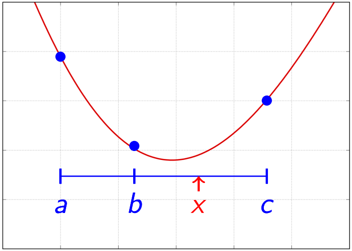
Entonces: $$\frac{x-b}{c-a} = w(1-w)$$

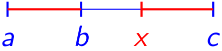
Además: $$\frac{x-b}{c-a} = \underbrace{\frac{x-a}{c-a}}_{1-w} - \underbrace{\frac{b-a}{c-a}}_{w}$$

$\rightarrow \qquad w^2 - 3w + 1 = 0 \qquad\qquad w_1 = 0.38197$

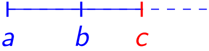
Sección "dorada"

Caso 1: $b - a < c - b$

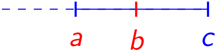




$f(b) < f(x)$:



$f(b) > f(x)$:

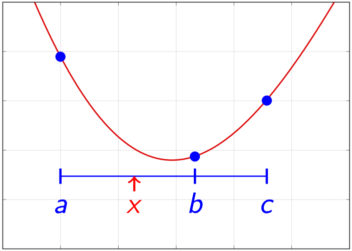


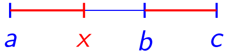
$$c - x = w_1(c - a)$$

$$x = a + (1 - w_1)(c - a)$$

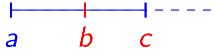
Sección "dorada"

Caso 2: $b - a > c - b$

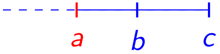




$f(b) > f(x)$:



$f(b) < f(x)$:



$$x - a = w_1(c - a)$$

$$x = a + w_1(c - a)$$

Algoritmo

Requerimientos

- $f(x)$ conocida
- Conocer un intervalo en el que se encuentra el mínimo de la función

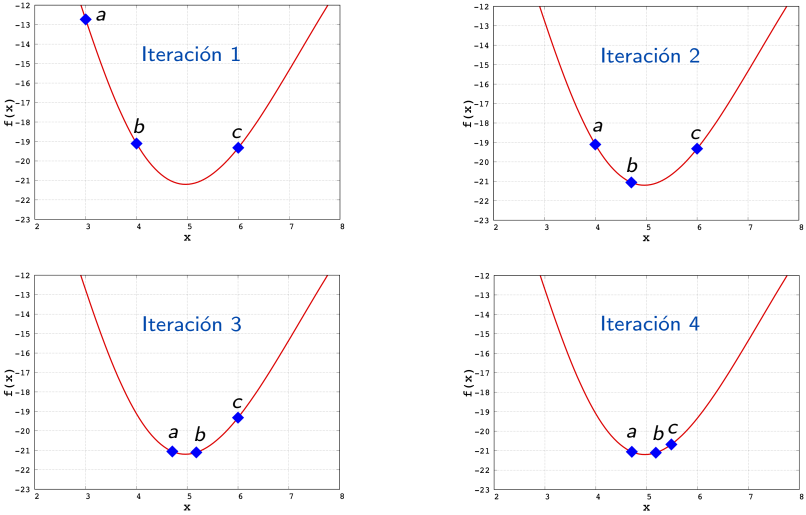
1. Definir tres puntos a, b, c tal que $a < b < x_{min} < c$ y la tolerancia δ
2. Actualizar el conjunto de puntos
   - Si $|a - b| < |b - c| \quad \to x = a + (1 - w_1)(c - a)$

     Si $f(x) > f(b) \to c = x$
     Si $f(x) < f(b) \to a = b, b = x$
   - Si $|a - b| > |b - c| \quad \to x = a + (1 - w_2)(c - a)$

     Si $f(x) > f(b) \to a = x$
     Si $f(x) < f(b) \to c = b, b = x$
3. Repetir el paso 2 hasta que $|c - b| < \delta$

Ejercicio

Función: $$f(x) = \frac{-x^5}{e^x - 1}$$



Casos de estudio:

Enlace NaCl.

Potencial de interacción:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V_0 e^{-r/r_0}$$

$$V_o = 1.09 \times 10^3 \, eV$$
$$r_o = 0.321 \text{Å}$$

Longitud de enlace?

Potencial del Lennard-Jones.

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right]$$

Encontrar r (en términos de σ) para el cual V es mínimo.

Método de Newton:

Condición para el mínimo: $$\frac{df(x)}{dx} = 0$$

Aproximación:

$$f(x) = f(x_0) + \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_0 (x - x_0) + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2 f}{\partial x^2}\right|_0 (x - x_0)^2 + \cdots$$

Entonces:

$$\frac{\partial f(x)}{dx} = \left.\frac{df}{dx}\right|_0 + \left.\frac{\partial^2 f}{dx^2}\right|_0 (x - x_0) + \cdots$$

Ecuación para el mínimo: $$\left.\frac{df}{dx}\right|_0 + \left.\frac{\partial^2 f}{dx^2}\right|_0 (x - x_0) = 0$$

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

Método de Newton

Algoritmo

Requerimientos:

- $f(x)$
- Estimación inicial x_0

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

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k + h) - f(x_k)}{h}$$

$$f''(x_k) = \frac{f(x_k + h) - 2f(x_k) + f(x_k - h)}{h^2}$$

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

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