Física Computacional

Escuela de Física

M.R.Fulla[1]

[1]Escuela de Física, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín

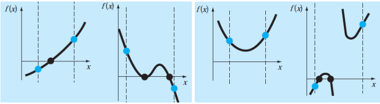
marlonfulla@yahoo.com- Oficina:21-408

https://sites.google.com/view/fiscomunalmed/

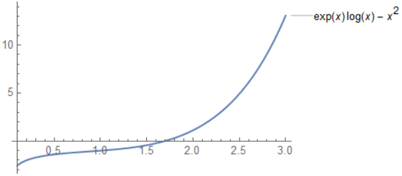
October 3, 2023

Método de la bisección

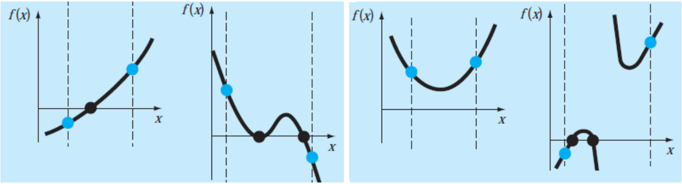
UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA




```fortran
      PROGRAM biseccion
      IMPLICIT NONE
      REAL(4)::x_i,x_d,x_r,deltax,f
      REAL(4),PARAMETER::tolerance=1.E-6
      INTEGER::istep=0

      DO
      WRITE(*,*) "Escriba los valores de x_i y x_d"
      READ(*,*) x_i,x_d
      IF(f(x_i)*f(x_d)<0) EXIT
      WRITE(*,*) "f(x_i)=",f(x_i),"f(x_d)=",f(x_d)
      WRITE(*,*) "No hay cambio de signo, repita nuevamente"
      END DO

      deltax=x_d-x_i

      DO WHILE(ABS(deltax)>=tolerance)
          x_r=(x_i+x_d)/2.
          IF(f(x_i)*f(x_r)<0.) THEN
              x_d=x_r
              deltax=x_d-x_i
          ELSE
              x_i=x_r
              deltax=x_d-x_i
          END IF

          istep=istep+1
      ENDDO

      WRITE(*,1) istep,x_r,deltax

    1 FORMAT(I4,2F16.8)

      END PROGRAM

      REAL FUNCTION f(x)
      REAL(4)::x
      f=EXP(x)*LOG(x)-x**2  !f(x)=exp(x)*ln(x)-x^2
      END FUNCTION
```



- Métodos de dominio cerrado (bracketing)
  - Método de la bisección



  - Método de la falsa posición (*Regula Falsi*)
- Métodos de dominio abierto
  - Método del Punto Fijo
  - Método de Newton-Raphson
  - Método de la secante

Características del método de la bisección

1. La raíz está atrapada en el intervalo $[x_i, x_d]$
2. El error máximo en el cálulo de la raíz es $|x_d - x_i|$
3. El número de iteraciones requeridas para reducir el intervalo inicial $x_d - x_i = b - a$ a uno específico $(x_d - x_i)_n$ se calcula a partir de:

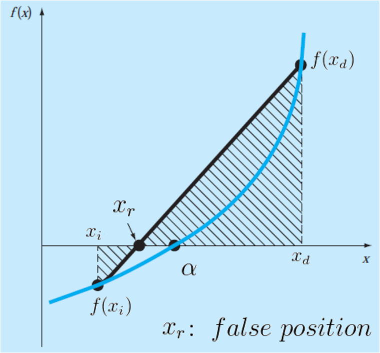
$$(x_d - x_i)_n = \frac{1}{2^n}(x_d - x_i)$$

de donde se obtiene:

$$\boxed{n = \frac{1}{ln\,2} ln(\frac{x_d - x_i}{(x_d - x_i)_n})}$$

Método de la Falsa Posición *(Regula Falsi)*

Método de Bisección → no considera $f(x_i)$ y $f(x_d)$



Por semejanza de triángulos

$$-\frac{f(x_i)}{x_r - x_i} = \frac{f(x_d)}{x_d - x_r}$$

Método de la Falsa Posición *(Regula Falsi)*

$$x_r = \frac{f(x_i)x_d - f(x_d)x_i}{f(x_i) - f(x_d)}$$

Tarea: demostrar que adicionando y sustrayendo x_d se llega a:

$$\boxed{x_r = x_d - \frac{f(x_d)(x_i - x_d)}{f(x_i) - f(x_d)}}$$ (Fórmula de la Falsa Posición)

El algoritmo de cálculo es muy similar al del método de la bisección.

Método de la Falsa Posición *(Regula Falsi)*

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

PASO 1: Seleccionar $x_i = a$ y $x_d = b$ / $f(x_i)f(x_d) < 0$

PASO 2: Obtener una raíz con posición falsa

$$x_r = x_d - \frac{f(x_d)(x_i - x_d)}{f(x_i) - f(x_d)}$$

PASO 3: Evaluar

- si $f(x_i)f(x_r) < 0 \rightarrow x_d = x_r$ y repita el paso 2
- si $f(x_i)f(x_r) > 0 \rightarrow x_i = x_r$ y repita el paso 2
- si se cumple un criterio de convergencia $\rightarrow$ finalizar cálculo

Método de la Falsa Posición *(Regula Falsi)*

Criterios de Convergencia:

1. $|x_d - x_i| < \epsilon_1$
2. $|f(x_r)| < \epsilon_2$
3. ambas 1 y 2
4. error relativo porcentual:

$$\epsilon_a = |\frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}}| < \epsilon_3$$

Método de la Falsa Posición *(Regula Falsi)*

Actividad: Escribir un programa en Lenguaje Fortran para búsqueda de raíces por el método de la regula falsi. Probar con el problema de la molécula de NaCl.

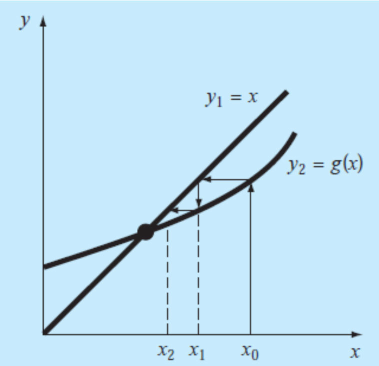
Método del Punto Fijo

Idea: transformar el problema $f(x) = 0$ en un problema de intersección de dos curvas. Adicionando a ambos lados x :

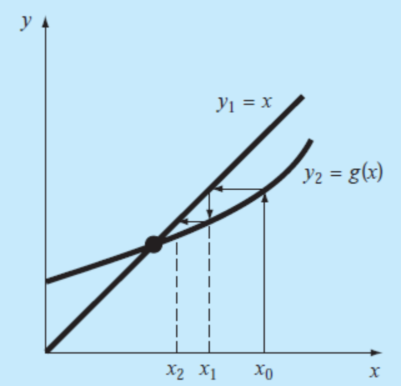
$$x = x + f(x)$$

$$\boxed{x = g(x)}$$

(Fórmula de iteración de punto fijo)



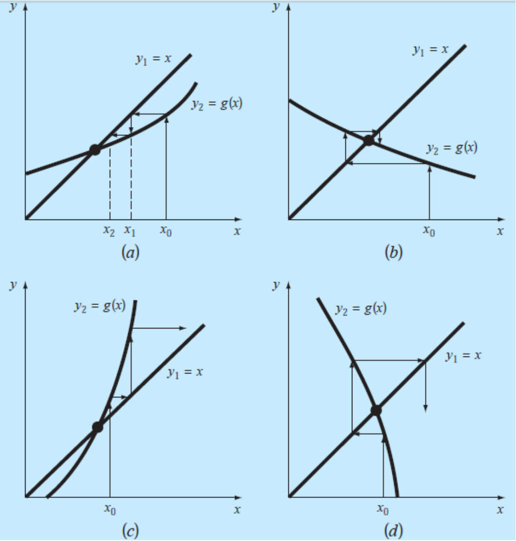
Método del Punto Fijo



PASO 1: seleccionar un x_0 y evaluar $g(x_0)$.
PASO 2: determinar sobre la curva y_1 las coordenadas del punto que se encuentra a la misma altura $(g(x_0), g(x_0)) = (x_1, g(x_0))$, así hemos obtenido $x_1 = g(x_0)$.
PASO 3: calcular $x_2 = g(x_1)$.
PASO 4: calcular $x_{i+1} = g(x_i)$ hasta cumplir con un criterio de convergencia.

Método del Punto Fijo

Otros casos:



Convergencia:

Consideremos la fórmula

$$x_{i+1} = g(x_i) \tag{1}$$

sea $x = \alpha$ la raíz y $e = x - \alpha$ el error, evaluando en α se obtiene:

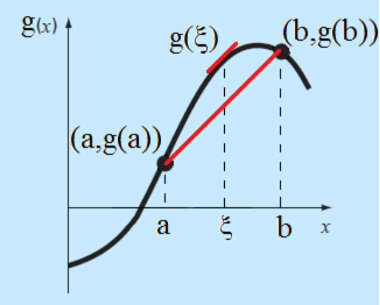
$$\alpha = g(\alpha) \tag{2}$$

substrayendo (1) -(2) se obtiene:

$$x_{i+1} - \alpha = e_{i+1} = g(x_i) - g(\alpha) \tag{3}$$

Método del Punto Fijo

usando el teorema del valor medio de la derivada: si $g(x)$ y $g'(x)$ son continuas en $[a, b]$, entonces existe un $x = \xi$ tal que:



$$g'(\xi) = \frac{g(b) - g(a)}{b - a} \qquad (4)$$

haciendo:

$a = x_i$ y $b = \alpha$ de (4):

$$g(\alpha) - g(x_i) = g'(\xi)(\alpha - x_i)$$

en (3)

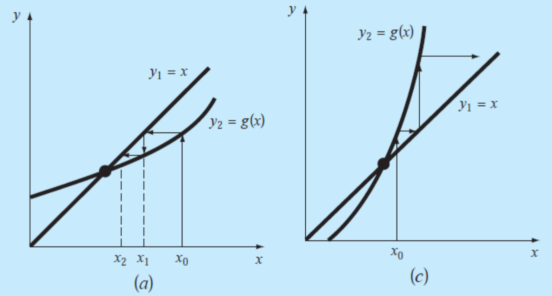
$$x_{i+1} - \alpha = g'(\xi)(x_i - \alpha)$$

Método del Punto Fijo

de donde se concluye:

$$g'(\xi) = \frac{x_{i+1} - \alpha}{x_i - \alpha} = \frac{e_{i+1}}{e_i}$$

- si $|g'(x)| < 1 \rightarrow$ existe convergencia
- si $|g'(x)| > 1 \rightarrow$ no existe convergencia

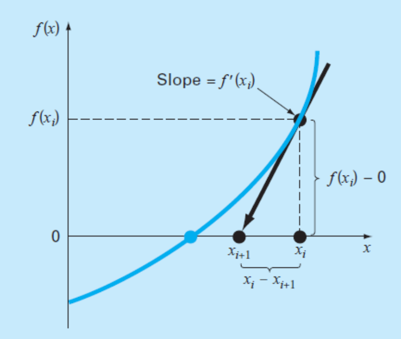


Actividad y Tarea

Actividad: Escribir un programa en Lenguaje Fortran para búsqueda de raíces por el método del punto fijo. Probar con el problema de la molécula de NaCl. Defina un parámetro que permita ajustar el número máximo de iteraciones para controlar el programa en casos eventuales de divergencia.

Método de Newton-Raphson

Selecciona con un criterio un x_i y traza una tangente desde el punto $(x_i, f(x_i))$ al punto de intersección con el eje x (estimativo de la raíz).



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

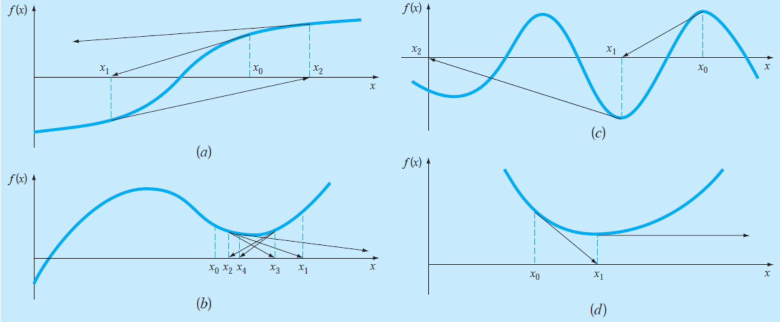
$$\boxed{x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}}$$

(Fórmula de Newton-Raphson)

Se puede mostrar: $e_{i+1} = -\frac{f''(\alpha)}{2f'(x_i)} e_i^2$ $\quad e_i = \alpha - x_i$, α: raíz

Método de Newton-Raphson

cuidados



Método de Newton-Raphson

```fortran
PROGRAM newton
IMPLICIT NONE
REAL::x_1,x_0,deltax,f,df
REAL,PARAMETER::tolerance=1.E-6
INTEGER::istep=0

deltax=2*tolerance

WRITE(*,*) "Ingrese el x0 de prueba:"
READ(*,*) x_0

DO WHILE(ABS(deltax)>=tolerance)
    x_1=x_0-f(x_0)/df(x_0)
    deltax=x_1-x_0
    x_0=x_1
    istep=istep+1
ENDDO

WRITE(*,1) istep,x_0,deltax

1   FORMAT(I4,2F16.8)

END PROGRAM
```

```fortran

FUNCTION f(x)
IMPLICIT NONE
REAL::x,f
f=EXP(x)*LOG(x)-x**2  !f(x)=exp(x)*ln(x)-x^2
END FUNCTION

FUNCTION df(x)
IMPLICIT NONE
REAL::x,df
df=EXP(x)*(LOG(x)+1./x)-2*x  !derivada de f(x)
END FUNCTION
```

Sugerencias

1. Ayuda de un graficador.
   - `https://www.wolframalpha.com` (online)
   - `https://pfortuny.net/fooplot.com/` (online)
   - `https://www.gnu.org/software/octave/` (executable)
2. Al final de la interación (o al final) imprimir el valor de la función en la raíz.
3. Incluir un número máximo de iteraciones.
4. Alertar sobre posibles divergencias.
5. Ser cuidadoso en la selección de los criterios de convergencia.

Comparación

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

```
Escriba los valores de x_i y x_d
1
3
   1      2.00000000      1.00000000
   2      1.50000000      0.50000000
   3      1.75000000      0.25000000
   4      1.62500000      0.12500000
   5      1.68750000      0.06250000
   6      1.71875000      0.03125000
   7      1.70312500      0.01562500
   8      1.69531250      0.00781250
   9      1.69140625      0.00390625
  10      1.69335938      0.00195312
  11      1.69433594      0.00097656
  12      1.69482422      0.00048828
  13      1.69458008      0.00024414
  14      1.69470215      0.00012207
  15      1.69464111      0.00006104
  16      1.69461060      0.00003052
  17      1.69459534      0.00001526
  18      1.69460297      0.00000763
  19      1.69459915      0.00000381
  20      1.69460106      0.00000191
  21      1.69460011      0.00000095
```

xr delta x

Bisección

```
Ingrese el x0 de prueba:
3
  1      2.42594838     -0.57405162
  2      2.00503945     -0.42090893
  3      1.76922190     -0.23581755
  4      1.69982779     -0.06939411
  5      1.69462824     -0.00519955
  6      1.69460094     -0.00002730
  7      1.69460094      0.00000000
```

xr delta x

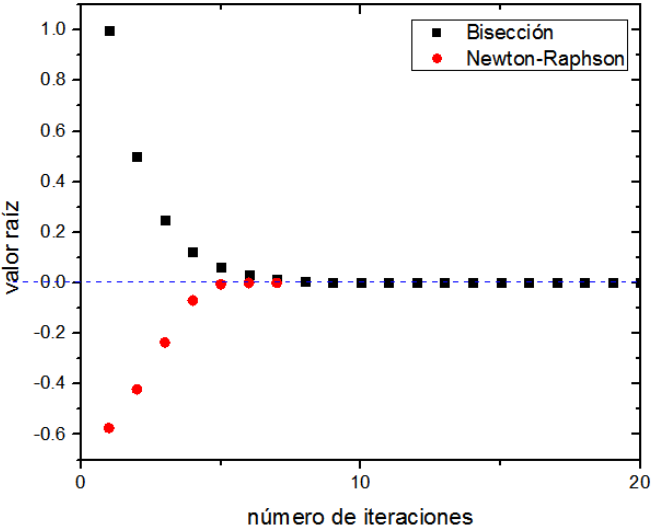
Newton-Raphson

```
Escriba los valores de x_i y x_d
1
3
  1     1.14218462      f(x_r)= -0.887995362
  2     1.26040924      f(x_r)= -0.772386372
  3     1.35750258      f(x_r)= -0.654925108
  4     1.43590069      f(x_r)= -0.541042328
  5     1.49809134      f(x_r)= -0.436269760
  6     1.54661846      f(x_r)= -0.344429016
  7     1.58394599      f(x_r)= -0.267168999
  8     1.61232030      f(x_r)= -0.204310894

 39     1.69459593      f(x_r)=  -1.35898590E-05
 40     1.69459724      f(x_r)=  -1.00135803E-05
 41     1.69459820      f(x_r)=  -7.15255737E-06
 42     1.69459903      f(x_r)=  -5.24520874E-06
 43     1.69459963      f(x_r)=  -3.57627869E-06
 44     1.69460011      f(x_r)=  -1.90734863E-06
 45     1.69460034      f(x_r)=  -1.66893005E-06
```

xr

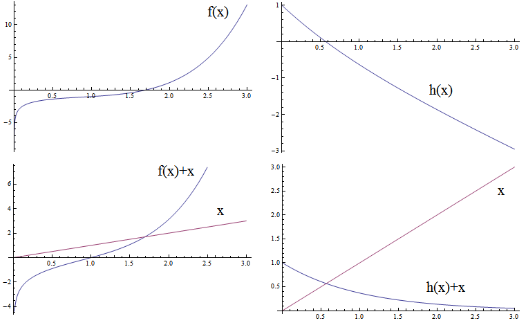
Regula-Falsi

Comparación



Actividad

1. Realizar un programa que implemente el método de la falsa posición para la función $f(x) = e^x ln(x) - x^2$.
2. Realizar un programa que implemente el método del punto fijo para la función $f(x) = e^x ln(x) - x^2$ y $h(x) = e^{-x} - x$, concluya.



3. encuentre la longitud de equilibrio de una molécula de NaCl empleando los dos métodos anteriores.