

Universidad de Chile
Facultad de Ciencias
Departamento de Física

Programación y Métodos Numéricos

Tarea Nº 9
Publicada el 13 de octubre de 2008

Profesor: José Rogan
Ayudantes: Carola Cerda
Manuel Ramírez
Tabatha Rodríguez
Alejandro Varas

1. El potencial de Lennard-Jones entre dos partículas separadas una distancia r es el siguiente:

$$U(r) = 4 \left[\left(\frac{1}{r} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r} \right)^6 \right]$$

Grafique el potencial en función de r con $r \in [1, 4]$, entregue un gráfico en formato **eps** incluyendo título y etiquetas en los ejes.

2. Nos interesa encontrar la distancia de equilibrio de dos partículas, es decir, el mínimo de este potencial o lo que es equivalente, encontrar el cero de la derivada.

Grafique la derivada analítica en función de r con $r \in [1, 4]$, entregue un gráfico en formato **png** incluyendo título y etiquetas en los ejes.

3. Escriba un programa en **C++** o en **Python** que use el algoritmo de Newton-Raphson¹ sobre la derivada² del potencial para encontrar donde ésta se anula. Use como valor inicial 0,5 y una precisión de 10^{-7} . Envíe el programa.
4. Grafique la sucesión de valores de r en función de las iteraciones que converge al cero de la derivada. Entregue un gráfico en formato **pdf** incluyendo título y etiquetas en los ejes.

Su tarea debe estar en el formato requerido y sus programas deben tener la extensión **.py** o **.cc** según corresponda. El **no** cumplimiento de lo anterior será evaluado con nota mínima.

ENTREGA EL LUNES 20 DE OCTUBRE DE 2008, ANTES DE LAS 12:00 P.M.

¹El algoritmo para encontrar un cero de $f(x)$ por Newton-Raphson se escribe como:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

²Para la derivada de $f(x)$ use la forma numérica:

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

con h del orden de 1×10^{-7} .