

Análisis Numérico

Trabajo Práctico 3

Primer cuatrimestre 2024

Instrucciones:

- Fecha de presentación: 26/07/24.
- Los grupos se conforman de 4 o 5 personas.
- Utilice todas las herramientas informáticas, lenguajes o herramientas en línea que considere convenientes (Mathematica, Wolfram Alpha, Qucs, Xcos, Sympy, Scilab, Octave, Scipy, Matplotlib, ImageJ, etc).
- Elabore un informe lo mas detallado posible, mencionando los problemas con los que se encontró intentando obtener las respuestas a las consignas.
- Subir al campus en un archivo comprimido único, **el informe en formato .pdf** y cualquier otro archivo que considere útil, como códigos u otros.
- Elaborar un video de no más de 3 minutos de duración sobre los aspectos más importantes del proceso y las conclusiones del trabajo. Subir el video al grupo de TEAMS.

1 Implementación del método Newton - Secante

Este método aproxima raíces de ecuaciones no lineales. Para la ecuación $f(x) = 0$, partiendo del intervalo $[a_n; b_n]$, obtiene una nueva aproximación con una idea similar al método de N-R, pero utilizando una pendiente de recta alternativa M_{NS} . El valor de M_{NS} se obtiene como un promedio ponderado de la pendiente de la recta que usa N-R ($f'(x)$) y la de la que usa el método secante ($\Delta f(x)/\Delta(x)$) para este mismo intervalo. Esta ponderación debe usar los valores de la derivada segunda de $f(x)$ en a_n y b_n .

- Muestre gráficamente lo que hace el método y defina matemáticamente la expresión para esta aproximación.
- Investigue cómo se reduce el error relativo porcentual respecto a las iteraciones con el método Newton-Raphson y Regula-Falsi para un caso escalar de su elección. Utilice este caso para verificar el buen funcionamiento de su implementación.
- Utilice el método implementado para determinar el pH en una columna de separación donde la concentración de ácido acético ($pK_a = 4.756$) crece linealmente de 1mM a 10 mM, e Hidróxido de amonio ($pK_a = 9.25$) que decrece linealmente de 10 mM a 1mM desde el principio al fin de la columna. El pH se calcula basándose en la hipótesis de electroneutralidad, es decir que la carga neta en cualquier punto i de la columna es nula, matemáticamente esto se escribe como:

$$[H^+]_i - [OH^-]_i + [NH_4^+]_i - [CH_3COO^-]_i = 0 \quad (1)$$

donde $K_w = [H^+][OH^-] = 10^{-14} \text{ mol m}^{-3}$ es la constante de disociación del agua y las concentraciones de iones acetato y amonio se calculan según sus constantes de disociación y el pH de la solución, i.e.:

$$pK_a = \log_{10} \left(\frac{[CH_3COOH]}{[CH_3COO^-][H^+]} \right) \quad (2)$$

$$pK_a = -\log_{10} \left(\frac{[NH_3][H^+]}{[NH_4^+]} \right) \quad (3)$$

Grafique la solución encontrada utilizando por lo menos 10 puntos.

- Compare en términos de complejidad y costo computacional el método Newton-Secante con un Newton para sistemas basado en diferenciación automática utilizando el caso del inciso anterior.

- e) Suponga ahora que la condición de electroneutralidad puede relajarse a una media de j puntos contiguos, i.e.:

$$\sum_{-j}^j \frac{1}{1+|j|} ([H^+]_j - [OH^-]_j + [NH_4^+]_j - [CH_3COO^-]_j) = 0 \quad (4)$$

Realice el mismo análisis del inciso anterior tomando 3 y 5 puntos contiguos y considerando diferentes métodos para la resolución del sistema lineal, para 100 y 1000 puntos. Utilice 3 estrategias en la comparación incluyendo al menos un método directo y un método iterativo.