



Actividad de Métodos Numéricos

* Resuelva cada uno de los siguientes problemas numéricos en un script por separado usando algún software de cálculo numérico (Matlab/Octave/Scilab).
* Responda las preguntas o explique las consignas mediante un comentario (%) en el mismo script. Si necesita hacer cálculos matemáticos manualmente puede hacerlos en una hoja en papel.
* Envíe a mataplifceia@gmail.com todos los scripts y funciones usadas, así como también los cálculos analíticos escaneados en los casos que sean necesarios. En el Asunto debe poner:
Actividad Métodos Numéricos - APELLIDO, NOMBRE - Software utilizado (Matlab u Octave o Scilab)

1. Sabemos que, por la asociatividad de la suma, matemáticamente son equivalentes:

$$(x + y) + z = x + (y + z) = x + y + z$$

- Calcule $x + y + z$ de las dos formas equivalentes $x + (y + z)$ y $(x + y) + z$ cuando $x = 516000$, $y = 2460$, $z = 60$, realizar el cálculo usando mantisa decimal de 3 dígitos con redondeo simétrico. Detalle los pasos en cada operación en forma separada, primero igualando exponentes y luego redondeando el resultado en cada paso. Explique los resultados obtenidos.
- Repita el ejemplo anterior en su software de cálculo numérico. Explique.
- Dé un ejemplo donde no valga la asociatividad en su máquina.

2. Ecuaciones de estado de los gases: la ecuación de Van der Waals

La ecuación de estado de los gases ideales, $p = \frac{RT}{v}$ siendo v [L/mol] el volumen molar, p [atm] la presión absoluta, T [°K] la temperatura absoluta y R la constante universal de los gases, si bien resulta muy fácil de manejar, no es una ecuación válida para ningún gas. Por lo general las moléculas de un gas real sufren interacciones entre ellas, y esto originará que su comportamiento difiera del correspondiente a un gas ideal. Para obtener comportamientos más parecidos al de los gases reales se han propuesto numerosas ecuaciones de estado que en su formulación incluyen, en cierta medida, este tipo de interacciones. La más conocida fue introducida por J.D. Van der Waals en 1873:

$$p = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2},$$

donde a y b son dos constantes positivas cuyo valor se puede ajustar y dependen del gas:

$$a = \frac{27R^2T_c^2}{64p_c}, \quad b = \frac{RT_c}{8p_c},$$

donde T_c y p_c son los valores de la temperatura y la presión en el punto crítico.

Obtenga los valores críticos del volumen molar para las diferentes sustancias

Sustancia	T_c [°K]	p_c [atm]	v_c [L/mol]
Dióxido de Carbono (CO_2)	304.2	72.9	
Oxígeno (O_2)	154.4	49.7	
Agua (H_2O)	647.4	218.3	
Helio (He)	5.2	2.26	

3. El método de Heun para sistemas de EDOs.

Considere el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs):

$$\begin{cases} x'(t) = f(t, x, y), \\ y'(t) = g(t, x, y), \end{cases} \quad x = x(t), y = y(t), \text{ con condiciones iniciales } \begin{cases} x(t_0) = x_0, \\ y(t_0) = y_0. \end{cases}$$

Podemos encontrar la solución numérica del sistema anterior en un intervalo $a \leq t \leq b$ usando el teorema fundamental del cálculo e integrando

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} f(t, x, y) dt = \int_{t_k}^{t_{k+1}} x' dt = x(t_{k+1}) - x(t_k), \quad k = 0, 1, \dots, n-1.$$

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} g(t, x, y) dt = \int_{t_k}^{t_{k+1}} y' dt = y(t_{k+1}) - y(t_k), \quad k = 0, 1, \dots, n-1.$$

Despejando $x(t_{k+1})$ y $y(t_{k+1})$ nos queda

$$x(t_{k+1}) = x(t_k) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(t, x, y) dt, \quad k = 0, 1, \dots, n-1.$$

$$y(t_{k+1}) = y(t_k) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} g(t, x, y) dt, \quad k = 0, 1, \dots, n-1.$$

Usando la regla del trapecio de integración con incremento $h = t_{k+1} - t_k$ se obtiene

$$x(t_{k+1}) \approx x(t_k) + \frac{h}{2} [f(t_k, x(t_k), y(t_k)) + f(t_{k+1}, x(t_{k+1}), y(t_k))], \quad k = 0, 1, \dots, n-1.$$

$$y(t_{k+1}) \approx y(t_k) + \frac{h}{2} [g(t_k, x(t_k), y(t_k)) + g(t_{k+1}, x(t_k), y(t_{k+1}))], \quad k = 0, 1, \dots, n-1.$$

Como en cada paso k -ésimo necesitamos las estimaciones de $x(t_{k+1})$ y $y(t_{k+1})$, usamos las aproximaciones de Euler para calcularlas que llamaremos \mathbf{p}_{k+1} y \mathbf{q}_{k+1} , con los cual iterativamente obtenemos las fórmulas recursivas del *método de Heun para sistemas de EDOs*:

$$\begin{cases} \mathbf{p}_{k+1} = x_k + h \cdot f(t_k, x_k, y_k), \\ x_{k+1} = x_k + \frac{h}{2} [f(t_k, x_k, y_k) + f(t_{k+1}, \mathbf{p}_{k+1}, y_k)], \\ \mathbf{q}_{k+1} = y_k + h \cdot g(t_k, x_k, y_k), \\ y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2} [g(t_k, x_k, y_k) + g(t_{k+1}, x_k, \mathbf{q}_{k+1})], \end{cases}$$

siendo $t_{k+1} = t_k + h$ para $k = 0, \dots, n-1$ los puntos de la discretización con paso $h = \frac{b-a}{n}$.

Considere el sistema de EDOs

$$\begin{cases} x' = 2x + 3y, \\ y' = 2x + y, \end{cases} \quad \text{con condiciones iniciales } \begin{cases} x(0) = -2.7, \\ y(0) = 2.8. \end{cases}$$

- Implemente el algoritmo `Heun_Sistemas.m` de modo de resolver sistemas de EDOs.
- Aproxime las soluciones del sistema anterior en el $[0, 1]$ con $n = 48$ subintervalos.
- Utilizando el comando `subplot`, compare con las soluciones exactas dadas por:

$$\begin{cases} x(t) = \frac{3}{50}e^{4t} - \frac{69}{25}e^{-t}, \\ y(t) = \frac{1}{25}e^{4t} + \frac{69}{25}e^{-t}, \end{cases}$$

y obtenga el error global final.