



MÉTODOS NUMÉRICOS APLICADOS A LA INGENIERÍA AMBIENTAL

MÉTODOS NUMÉRICOS APLICADOS A LA INGENIERÍA AMBIENTAL

Publicado por:	Universidad Técnica Estatal de Quevedo. Dir. Av. Quito km 1½ vía a Santo Domingo de los Tsáchilas, Quevedo, Ecuador. www.uteq.edu.ec .
Derechos reservados:	© Universidad Técnica Estatal de Quevedo, Ecuador 2022. Dirección de Investigación Ciencia y Tecnología (DICYT). Se autoriza la reproducción de esta publicación con fines educativos y otros que no sean comerciales sin permiso escrito previo de contar con el derecho de autor, mencionando la cita.
Cita del libro:	Montilla Y. y Bosquez A. 2022. Métodos numéricos aplicados a la Ingeniería Ambiental. Universidad Técnica Estatal de Quevedo, Ecuador. 238 pp.
Revisión de Pares Externos:	Jesús Alexis Quintero Moreno Magister Scientiarum en Ciencias Mención Física - Matemática. Universidad Centroccidental Lisandro Alvarado - Venezuela Jesús Enrique Erazo Puentes Magister en Física Fundamental. Universidad Politécnica Territorial de Mérida Kléber Ramírez - Venezuela.
Diseño y Diagramación:	Ing. J. Bladimir Mora Macías Diseñador Gráfico y Multimedia.
Primera Edición:	Quevedo, Diciembre del 2022.
ISBN:	978-9978-371-52-7

PRESENTACIÓN

El Comité Editorial de la Universidad Técnica Estatal de Quevedo (UTEQ) es la unidad encargada de promover, gestionar y administrar el conocimiento resultante de las actividades de investigación científica, la docencia y la vinculación de docentes y estudiantes. Dentro del procedimiento para el reconocimiento al profesorado y estudiantado de la UTEQ se contempla la publicación como libros de Tesis de grado y posgrado que se distingan por su innovación, metodología, rigor técnico o impacto social.



MÉTODOS NUMÉRICOS APLICADOS A LA INGENIERÍA AMBIENTAL

AUTORES:

Yomber José Montilla López
Angelita Leonor Bosquez Mestanza



CONTENIDO

	PREFACIO	ix
	PAUTAS DE ESTUDIOS EN LA RESOLUCIÓN DE EJERCICIOS	xii
	EDWARD NORTON LORENZ BIOGRAFÍA	xiv
CAPÍTULO	1 INTRODUCCIÓN A LOS MÉTODOS NUMÉRICOS	1
	1.1 Soluciones analíticas vs soluciones numéricas	2
	1.2 Aspectos de las soluciones numéricas	3
	1.3 Manejo de resultados numéricos	4
	1.4 Errores en cálculo numéricos	5
	1.5 Hoja de cálculo Excel en los métodos numéricos	11
	1.6 Los métodos numéricos en la Ingeniería Ambiental	15
	1.7 Ejercicios propuestos	16
	1.8 Proyecto para grupo: Modelo simple de disolución.	22
CAPÍTULO	2 RAÍCES DE ECUACIONES Y PUNTOS ÓPTIMOS	23
	2.1 Solución numérica de ecuaciones de una variable	24
	2.2 Método gráfico	25
	2.3 Métodos cerrados	27
	2.3.1 Método de bisección	28
	2.3.2 Método de falsa posición	31
	2.4 Métodos abiertos	35
	2.4.1 Método de Newton-Raphson	35
	2.4.2 Método de la Secante	39
	2.5 Puntos óptimos	42
	2.6 Valores máximos y mínimos	42
	2.6.1 Búsqueda de sección dorada	46
	2.6.2 Método de Newton	51
	2.7 Ejercicio de aplicación: Cálculo de niveles de oxígeno	54
	2.8 Ejercicios propuestos	58
	2.9 Proyecto para grupo: El pH del agua	64
CAPÍTULO	3 AJUSTE DE CURVAS POR MÍNIMOS CUADRADOS	66
	3.1 Modelos matemáticos de un conjunto de datos	67

	3.1.1	Métodos de mínimos cuadrados	68
	3.2	Regresión lineal	69
	3.3	Regresión polinomial	73
	3.3.1	Regresión cuadrática	74
	3.4	Regresiones no lineales y su linealización	77
	3.5	Ajuste de curvas con funciones sinusoidales	82
	3.6	Interpolación polinomial	87
	3.6.1	Polinomio de interpolación de Newton en diferencia dividida	88
	3.7	Ejercicio de aplicación: Incremento de microplásticos	92
	3.8	Ejercicios propuestos	97
	3.9	Proyecto para grupo: Producto iónico del agua	106
CAPÍTULO	4	INTEGRACIÓN Y DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA	108
	4.1	Solución numérica de una integral definida	109
	4.2	Integración numérica: Fórmula de integración de Newton-Cotes	111
	4.2.1	Regla de punto medio	112
	4.2.2	Regla de los trapecios	117
	4.2.3	Regla Simpson 1/3	121
	4.3	Derivación numérica: Fórmula de Taylor y diferencias finitas divididas	124
	4.3.1	Fórmulas de diferenciación de orden superior hacia adelante, hacia atrás y centrada	127
	4.4	Ejercicio de aplicación: Cálculo de consumo de energía eléctrica en un horario nocturno	131
	4.5	Ejercicios propuestos	135
	4.6	Proyecto para grupo: Hidrogeometría de una corriente	143
CAPÍTULO	5	SOLUCIÓN NUMÉRICA DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS	145
	5.1	Solución numérica de un PVI de primer orden	146
	5.1.1	Método Euler: Aproximación por rectas tangentes	148
	5.2	Métodos de Runge-Kutta	154
	5.2.1	Fórmulas de Runge-Kutta	155
	5.3	Sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias	162
	5.4	Solución numérica de un PVF de segundo orden	170

	5.4.1 Método del disparo	170
	5.4.2 Método de diferencias finitas	177
	5.5 Ejercicio de aplicación: Dinámica de población depredador - presa	181
	5.6 Ejercicios propuestos	184
	5.7 Proyecto para grupo: Dinámica de fluido atmosférico	195
	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICA	197
APÉNDICES	A Sistemas de Ecuaciones lineales: Método de la matriz inversa	200
	B Minimización de la suma total de los cuadrados de las desviaciones	202
	C Regla Simpson 3/8	204
	D Respuesta de los problemas con literales seleccionados	206
	GLOSARIO DE TÉRMINOS	216
	ACERCA DE LOS AUTORES	222

PREFACIO

El presente manuscrito es producto de varios años de experiencia de los autores, quienes dictan el curso de métodos numéricos aplicados a la ingeniería ambiental a los estudiantes de la carrera en este campo y tiene como propósito presentar pedagógicamente e ilustrativamente la aplicación de las matemáticas al estudio del medio ambiente puesto que a simple vista no pareciera haber ninguna relación entre ambas. Aunque el texto puede ser utilizado por cualquier estudiante de ciencias e ingeniería se tiene que los ejemplos desarrollados, los ejercicios propuestos y los proyectos de grupos están relacionados o tienen alguna afinidad con estudios de caso que involucran el análisis de la dinámica del medio ambiente. Se asume que el estudiante maneja las ideas básicas del cálculo diferencial, integral y ecuaciones diferenciales, así como también, que posee conocimiento previo y nociones básicas del manejo de la hoja de cálculo Excel dado que los métodos numéricos van de la mano con el uso de una herramienta informática de programación de cálculo. Es de resaltar que a pesar que existen múltiples herramientas informáticas para el análisis de los métodos numéricos, por fines didácticos y socioeconómicos se ha elegido la hoja de cálculo Excel. Desde una perspectiva didáctica es una herramienta de suma utilidad puesto que presenta una gran cantidad de información de forma estética y ordenada, además, la misma permite analizar datos, tratar errores, calcular promedios, ajustar las relaciones de los datos a curvas, usar distintas fórmulas para valorar las relaciones existentes entre las variables de un fenómeno y realizar modelizaciones. Desde una perspectiva socioeconómica el software es de fácil adquisición, es común y no requiere de muchos recursos de un ordenador para su implementación.

En cuanto a la distribución del contenido, el libro está dividido en 6 secciones las cuales constan de 5 capítulos y un apéndice. Cabe resaltar que todos los gráficos fueron realizados por los autores. El capítulo 1 se titula introducción a los métodos numéricos, en él se exponen las definiciones básicas tales como soluciones analíticas, soluciones numéricas, errores y cifras significativas. Asimismo, se

introduce la utilidad de la hoja de cálculo Excel como herramienta gráfica y práctica para realizar cálculos numéricos. Seguidamente se observa el capítulo 2 el cual tiene por título raíces de ecuaciones y puntos óptimos, aquí se exponen los métodos cerrados y abiertos que permiten resolver numéricamente ecuaciones lineales y no lineales con una incógnita. Cabe mencionar que en este capítulo no se muestran las deducciones matemáticas de los métodos, sino que se presentan las formulaciones de forma directa con sus respectivas interpretaciones geométricas apoyadas de un gran número de figuras. Consecutivamente se desarrolla el capítulo 3 y este tiene por nombre ajuste de curvas por mínimos cuadrados, en dicho apartado se exhibe el método de los mínimos cuadrados como técnica numérica utilizada para construir modelos matemáticos predictivos a partir de un conjunto de datos. Cada modelo ilustrado viene acompañado de su representación gráfica. Es de resaltar que la mayoría de los datos empleados en los ejemplos y ejercicios propuestos provienen de fuentes confiables que manejan datos de variables ambientales. Luego se presenta el capítulo 4 denominado integración y diferenciación numérica, en este se ilustran las fórmulas de integración de Newton-Cotes, apoyada de representaciones gráficas, para obtener el área bajo la curva representada por una integral definida. También se vislumbran las fórmulas de diferenciación numérica producto de las expansiones de la serie de Taylor. En los ejemplos y ejercicios propuestos se integran diversas funciones de probabilidad que modelizan fenómenos ambientales. Posteriormente se tiene el capítulo 5 titulado soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales ordinarias, aquí se presentan las fórmulas de Runge-Kutta para obtener soluciones numéricas de problemas de valores iniciales y los métodos numéricos para resolver problemas de valores en la frontera. En esta sección se afianza la importancia de los ordenadores en los cálculos numéricos, ya que se manejan cientos e inclusive miles de cálculos producto de una solución. Para finalizar, se agrega la sección de apéndice donde se presenta el método de la matriz inversa y su inserción en Excel para resolver sistemas de ecuaciones con un gran número de ecuaciones e incógnitas, luego la minimización de la suma total de los cuadrados de las desviaciones para ilustrar cómo los mínimos cuadrados permiten

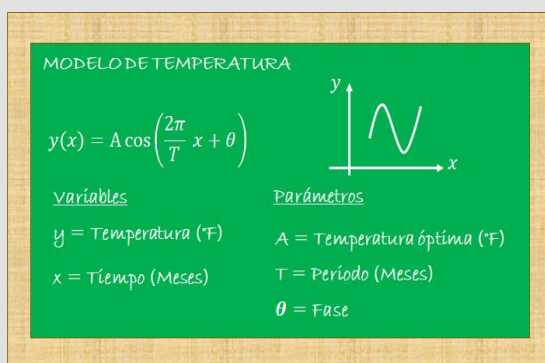
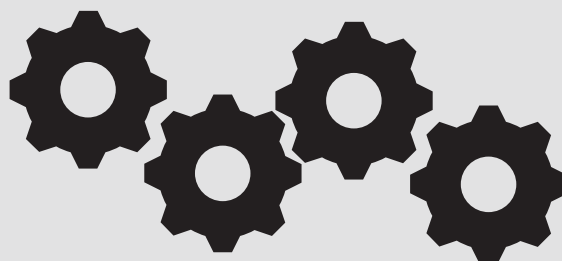
encontrar los parámetros de un ajuste, seguido la regla Simpson 3/8 completando las fórmulas de integración numérica y por último las repuesta a los problemas con literales seleccionados para que el lector verifique que el proceso de cálculo ha sido efectuado correctamente bajo las instrucciones dadas.

PAUTAS DE ESTUDIOS EN LA RESOLUCIÓN DE EJERCICIOS

En la presente obra, al culminar cada capítulo se exponen una serie de ejercicios propuestos para poner en práctica los conocimientos adquiridos. Se recomienda al lector las siguientes pautas

Conceptualizar

Al abordar un problema se debe pensar y comprender la situación. Estudie cuidadosamente cualesquiera representaciones de la información que acompañen al problema.



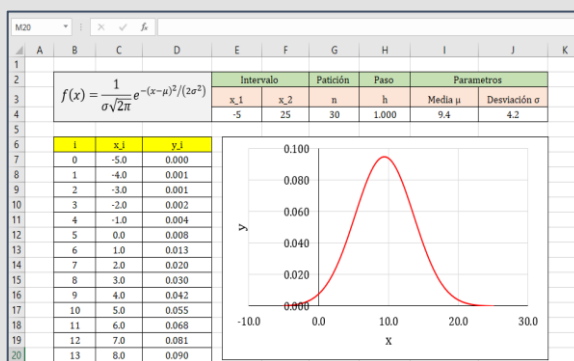
Identificar

En cada uno de los planteamientos reconozca las variables independientes y dependientes, representándolas como x e y respectivamente. Posteriormente identifique los parámetros resaltando su significado y el papel que juegan en el modelado. Suelen presentarse ejercicios que contienen varias variables dependientes.

Graficar

Tiene libertad de explotar la creatividad diseñando y personificando la hoja de cálculo (herramienta utilizada), se sugiere realizar gráficos para todos los planteamientos, considerando que es necesario definir como valores de entrada el intervalo de la función, la cantidad de puntos, el paso (distancia entre los puntos) y los parámetros.

Debe prestar mucha atención para que al insertar las funciones no olvide usar adecuadamente los paréntesis. Asimismo, es necesario verificar que la configuración del separador decimal de los números sea una coma o punto dado que esto puede generarle errores y puede provocar confusión. En algunos casos solo se necesita emplear diagramas de dispersión



Método de Newton					
$f(x) = 10 - 20(e^{-0.15x} - e^{-0.5x})$ $f'(x) = 3e^{-0.15x} - 10e^{-0.5x}$ $f''(x) = 5e^{-0.5x} - \frac{45}{100}e^{-0.15x}$					
Valores de entrada para la gráfica Punto inicial					
x.1	x.2	n	Paso	x.i	
0	10	20	0.5	4	

Tabla de valores					
i	x	e			
0	0	10.0000			
1	0.5	7.021			
2	1	4.916			
3	1.5	3.477			
4	2	2.541			

Algoritmo de Newton					
$x_{i+1} = x_i - \frac{f'(x_i)}{f''(x_i)}, \quad i = 0, 1, 2, 3, \dots, n$					

i	x.i	f(x.i)	f'(x.i)	f(x.i)/f'(x.i)	E.a%
0	4.000	-0.293	0.430	0.682	
1	3.318	-0.080	0.678	-0.117	20.556

$=F9$
 $=3*EXP(-0.15*G13)-10*EXP(-0.5*G13)$
 $=ABS((G14-G13)/G14)*100$
 $=F13+1$
 $=(-45/100)*EXP(-0.15*G13)+5*EXP(-0.5*G13)$
 $=H13/I13$

Ejecutar

Acorde al caso a desarrollar, inserte el algoritmo en la hoja de cálculo Excel. Comúnmente solo se programa una fila ya que con las opciones de arrastre automáticamente se generan los cálculos de las iteraciones sucesivas que se aproximan al resultado.

La convergencia del resultado se verifica al observar que a medida que se sigue el proceso de iteración el error verdadero (si se conoce el valor real) o error aproximado van disminuyendo. De presentarse un aumento en esta cantidad verificar que la inserción de fórmulas en Excel esté correcta.

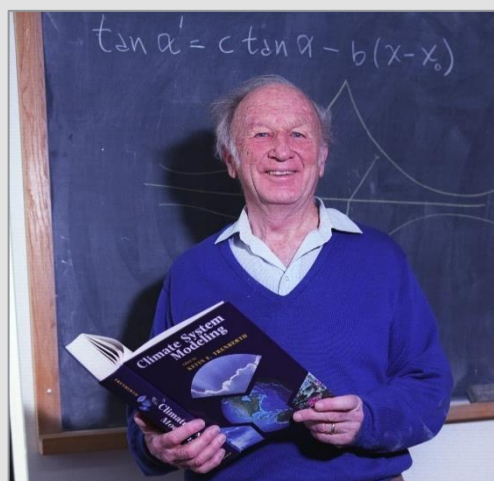
Finalizar

Terminar el cálculo acorde a lo indicado en el planteamiento. Examine su respuesta numérica. ¿Satisface las expectativas de su conceptualización del problema? ¿Tiene sentido? Para practicar sería útil que vuelva a revisar los ejemplos trabajados en cada capítulo, identificando cada uno de los pasos presentados.



EDWARD NORTON LORENZ

Edward Norton Lorenz (padre de la teoría del caos), nació en West Hartford, Connecticut (EEUU) el 23 de mayo de 1917 y murió el 16 de abril de 2008 de cáncer, en su casa de Cambridge a la edad de 90 años. Fue un meteorólogo del MIT (Instituto de Tecnología de Massachusetts) pionero en el desarrollo de la teoría del caos y quien acuñó el término efecto mariposa en el estudio de sistemas dinámicos. Lorenz trató de explicar por qué es tan difícil obtener las previsiones meteorológicas, dando lugar a una revolución científica llamada teoría del caos.



Edward Norton Lorenz. Fotografía: Percy Cayetano Acuña Vigil (Hatun Llaqta)

En la víspera del año 1963, este ilustre científico desarrolla una investigación sobre el tiempo atmosférico a través de ecuaciones con ordenador y decidió repasar algunos de los datos que había obtenido. Mientras se hacía un café (esto es literal), el ordenador simuló los resultados de dos meses que en nada se parecían a los que ya tenía. Para simplificar las operaciones y porque la impresora no aceptaba más de tres decimales, Lorenz decidió **reducir de seis a tres** los decimales de uno de los parámetros con los que calculaba las predicciones (por ejemplo: de 53.453765 kilómetros por hora, pasó a usar 53.453 kilómetros por hora). El paradigma estaba claro, una variación mínima inicial puede producir **alteraciones a corto y medio plazo**. Lorenz publicó las conclusiones de su descubrimiento en el *Journal of the Atmospheric Sciences* bajo el título «Flujo determinista no periódico» en 1963.

Lorenz fue el salto de las leyes deterministas de Newton y la aplicación de ecuaciones hacia las simulaciones de hoy en día. Estas últimas son de gran importancia en el estudio de múltiples fenómenos que incluyen los relacionados con el clima, dinámica de poblaciones, movimiento de planetas entre otros.

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN A LOS MÉTODOS NUMÉRICOS

En este capítulo se estudiarán las definiciones básicas relacionadas con los resultados numéricos producto de la solución numérica de un problema de modelización matemática.

1.1. Soluciones analíticas vs soluciones numéricas.

1.2. Aspectos de las soluciones numéricas.

1.3. Manejo de resultados numéricos.

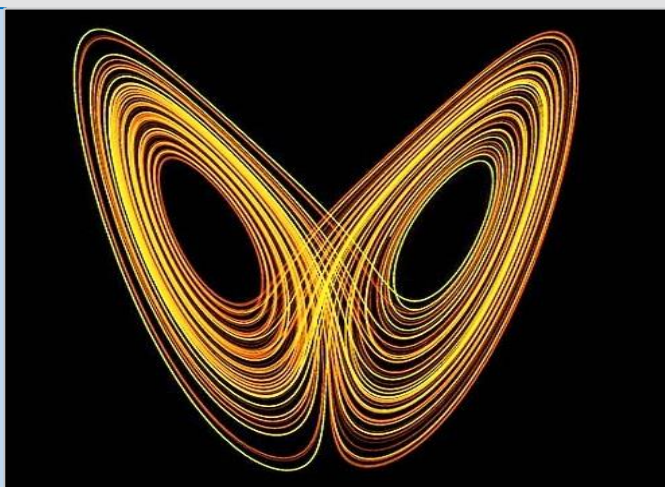
1.4. Errores en cálculo numéricos.

1.5. Hoja de cálculo Excel en los métodos numéricos.

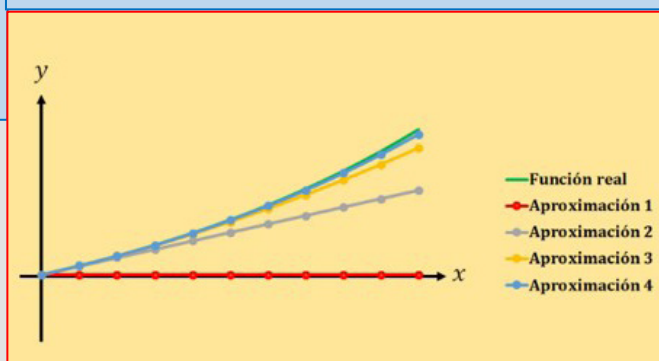
1.6. Los métodos numéricos en la Ingeniería Ambiental

1.7. Ejercicios propuestos.

1.8. Proyecto para grupo: Modelo simple de disolución.



La mariposa del caos. Según el programa de las naciones unidas para el medio ambiente, uno de los problemas ambientales existente y emergente es la vulnerabilidad humana ante el cambio climático. Las curvas mariposas son resultados numéricos del modelo de Lorenz que es ampliamente utilizado para hacer pronósticos del tiempo, así como como también para estudiar la contaminación del aire y el cambio climático mundial. Fotografía: Elena Soto (El Mundo).



1.1 Soluciones analíticas vs soluciones numéricas

Un problema de modelización matemática puede tener solución(es) analítica (s) (también denominada solución exacta) o solución numérica. Según el caso y el sistema a estudiar ambas soluciones pueden representarse gráficamente. Las soluciones analíticas son obtenidas mediante **métodos analíticos** que representan soluciones basadas en fórmulas matemáticas, desarrolladas generalmente de forma manual, en las que se definen variables de entrada para el cálculo de una o más variables de salida. Mientras que los **métodos numéricos** son técnicas de la matemática que permiten expresar la solución de un problema en forma de números. Para ilustrar considere los dos problemas de valores iniciales (ecuación diferencial con condiciones iniciales) que se ilustran en la Fig. 1.1.

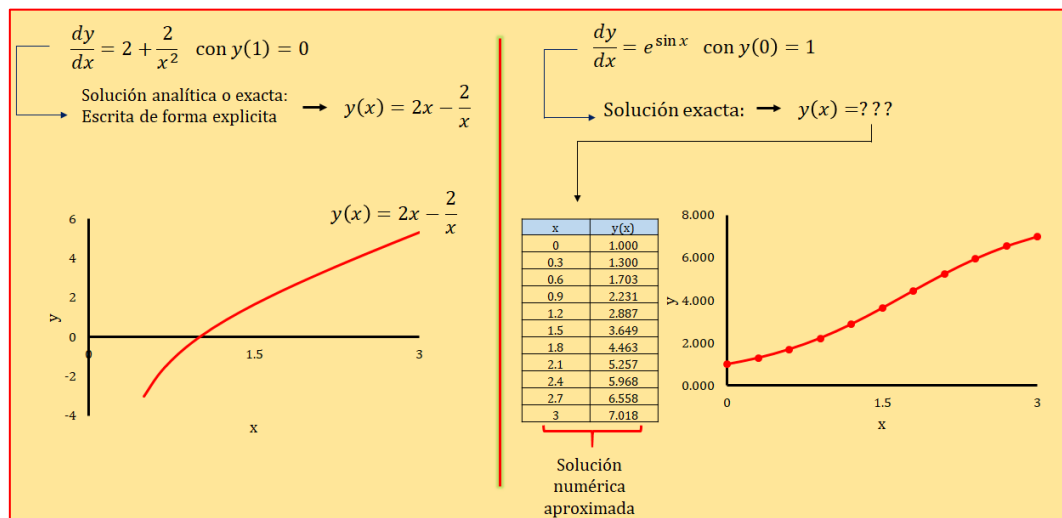


FIGURA 1.1. Solución analítica y solución numérica de dos PVI.

El primero es la ecuación diferencial $y'(x) = 2 + 2/x^2$ con la condición inicial $y(1) = 0$, si se emplean métodos analíticos como por ejemplo el método de separación de variables combinado con los métodos y técnicas de integración se obtiene la solución analítica al problema que vienen dado por $y(x) = 2x - 2/x$. Utilizando las herramientas del cálculo diferencial o las de un graficador se puede

obtener la representación gráfica. El segundo es la ecuación diferencial $y'(x) = e^{\sin x}$ con la condición inicial $y(0) = 1$, en este caso a pesar de que se puede separar variables* no se puede integrar la ecuación respecto a la variable independiente x para así obtener una solución en términos de las funciones elementales. Sin embargo, al emplear métodos numéricos pueden obtenerse resultados numéricos aproximados representados en forma tabular de valores de y para ciertos valores de x con su respectiva gráfica. Por lo tanto, se concluye que los métodos numéricos, buscan números, mientras que los métodos analíticos buscan fórmulas matemáticas, es decir, información cuantitativa sobre el comportamiento de un sistema. Sin embargo, tanto los métodos numéricos como los analíticos comparten un punto inicial fundamental: **la necesidad de plantear en forma matemática un problema.**

1.2 Aspectos de las soluciones numéricas

Al aplicar técnicas numéricas para buscar la solución de un problema de modelización matemáticas se debe considerar lo siguiente:

- Los resultados numéricos obtenidos son resultados aproximados. Los números comúnmente son racionales e irracionales.
- Los resultados numéricos se obtienen empleando **algoritmos** (Conjunto ordenado de operaciones sistemáticas que permiten hacer un cálculo y hallar la solución de un tipo de problema).
- El desarrollo de los cálculos implica realizar **iteraciones** (repetir un proceso con el objetivo de acercarse a un resultado).
- Debido a la naturaleza aproximada de los resultados, los mismos vienen acompañados de **errores**.

Como se apreciará en el desarrollo del libro, en diversos cálculos numéricos se emplearán una gama de algoritmos que al aplicarlos involucran múltiples cálculos

iterativos que proporcionan una gran cantidad de números. Es por ello que los ordenadores y las herramientas informáticas juegan un papel muy importante al momento de construir soluciones numéricas.

En la actualidad existen diversos lenguajes de programación diseñados para construir soluciones numéricas de un problema de modelización, para fines didácticos en este libro se utilizará la herramienta informática **hoja de cálculo Excel**. Es de resaltar que los métodos numéricos son herramientas muy poderosas para la solución de problemas. Estos son capaces de manipular sistemas de ecuaciones grandes, manejar no linealidades y resolver geometrías complicadas comunes en la práctica de la ingeniería y a menudo imposibles de resolver en forma analítica. Por lo tanto, la habilidad de resolver problemas para quien lo estudia.

1.3 Manejo de resultados numéricos

Lo que sigue es presentar algunos conceptos básicos referentes a la representación aproximada de resultados numéricos. Dado que a la hora de realizar un cálculo es importante certificar que los números que intervienen en el cálculo se pueden utilizar con confianza. En primer lugar, se introduce el concepto de **cifras significativas**, que designa formalmente la confianza de un valor numérico y son aquellas que pueden utilizarse con confianza. En segundo lugar, se suman los conceptos de exactitud y precisión. **La exactitud** mide la proximidad entre los valores calculados y los valores exactos, mientras que la **precisión** hace referencia a la proximidad entre los valores calculados (Esquerro, 2021). En tercer lugar, se tiene que ciertas cantidades tales como π , e , φ o $\sqrt{5}$ representan cantidades específicas, sin embargo, no se pueden expresar exactamente como un número finito de dígitos porque tienen infinitos decimales; es decir que al escribirla manualmente o al ser retenidas por calculadoras solo se toma un número finito de cifras significativas omitiendo el resto de ellas. Así pues, se introduce el concepto de **error de redondeo** como la omisión del resto de cifras significativas. La Fig. 1.2 muestra el número π en un calculador redondeado a ciertos números de cifras significativas.

A pesar de que hasta la fecha se han encontrado 62 831 853 071 796 de dígitos, la calculadora solo muestra 10.

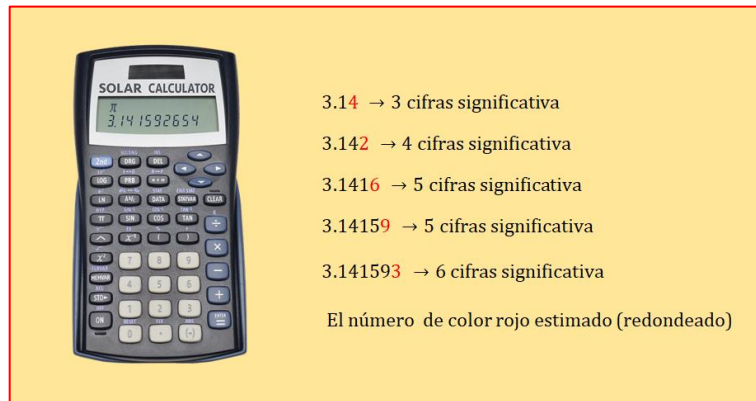


FIGURA 1.2. Redondeo y cifras significativas del número π . Imagen de la calculadora tomada de Pixabay.

1.4 Errores en cálculo numéricos

Los errores numéricos surgen del uso de aproximaciones para representar operaciones y cantidades matemáticas exactas. Primeramente, se tiene el **error de redondeo**, mencionado en la sección anterior como aquel que se produce cuando se usan números que tienen un límite de cifras significativas para representar números exactos. Seguidamente, se tienen los **errores de truncamiento** que son producto del empleo de aproximaciones como un procedimiento matemático exacto (Chapra y Canale, 2007). Para ambos tipos de errores, la relación entre el resultado exacto o verdadero y el resultado aproximado está dada por:

$$\text{Valor verdadero} = \text{Valor aproximado} + \text{error} \quad (1.1)$$

Ahora bien, al reordenar se desprende que el error numérico es igual a la diferencia entre el valor verdadero y el valor aproximado, esto es:

$$E_t = \text{Valor verdadero} - \text{Valor aproximado} \quad (1.2)$$

donde E_t se usa para denotar el valor exacto del error. El subíndice t indica que se trata del error “verdadero” (en inglés true).

La definición de error verdadero dada en la Ec. 1.2 tiene dos desventajas. La primera es que no toma en consideración el orden de la magnitud del valor que se estima. Por ejemplo, un error de un milímetro es mucho más significativo si se está midiendo un tornillo en lugar de un edificio. Es por ello que para tomar en cuenta las magnitudes de las cantidades que se evalúan se debe normalizar el error respecto al valor verdadero, esto es:

$$\begin{aligned} \text{Error relativo fraccional verdadero} &= \frac{\text{Error verdadero}}{\text{Valor verdadero}} \\ \varepsilon_t &= \frac{\text{Valor verdadero} - \text{Valor aproximado}}{\text{Valor verdadero}} \end{aligned} \quad (1.3)$$

donde ε_t (en valor absoluto) es una cantidad comprendida entre 0 y 1. En muchos casos es conveniente expresar este error en porcentajes (%) por lo que al multiplicarlo por 100% resulta:

$$\varepsilon_{t\%} = \frac{\text{Valor verdadero} - \text{Valor aproximado}}{\text{Valor verdadero}} 100\% \quad (1.4)$$

siendo $\varepsilon_{t\%}$ el error relativo porcentual verdadero. Dado que los errores relativos y porcentuales son más significativos que los errores verdaderos y aparte de ello proporcionan una bondad más realista del resultado numérico, estos son los que se van a considerar a lo largo del texto. Ahora retornando a las desventajas de la definición de error verdadero (dada en la Ec. 1.2), se tiene de segundo lugar que el cálculo requiere del conocimiento del valor verdadero. Asimismo, esta desventaja también se presenta en las definiciones de error relativo y porcentual mostrada en la Ec. 1.3 y en la Ec.1.4 respectivamente. Este valor solo se conocerá cuando se tengan funciones que se resuelven analíticamente tal como se observa en el ejemplo de la Fig. 1.1. En efecto, Al no disponer de un resultado analítico, una opción es

normalizar el error usando la mejor estimación posible al valor verdadero; es decir, para la aproximación misma, como en la siguiente expresión:

$$\varepsilon_a = \frac{\text{Error verdadero}}{\text{Valor verdadero} - \text{Valor aproximado}} \quad (1.5)$$

donde el subíndice a significa que el error está normalizado a un valor aproximado. Cabe resaltar que unos de los grandes desafíos que enfrentan los métodos numéricos es el de calcular estimaciones del error cuando no se dispone del conocimiento de los valores verdaderos (Chapra y Canale, 2007). Por ejemplo, diversos métodos numéricos que se presentarán en el desarrollo de este libro usan cálculos iterativos para determinar los resultados. En tales cálculos se hace una aproximación teniendo en cuenta el resultado anterior. Este proceso se efectúa varias veces, con el objetivo de obtener mejores aproximaciones o la convergencia de los resultados. En tales casos el error se estima como la diferencia entre la aproximación previa y la actual. Por lo tanto, el error relativo porcentual está dado por:

$$\varepsilon_{a\%} = \frac{\text{Aproximación actual} - \text{Aproximación anterior}}{\text{Aproximación actual}} 100\% \quad (1.6)$$

siendo $\varepsilon_{a\%}$ el error aproximado relativo porcentual. Nótese que $\varepsilon_{a\%}$ puede ser una cantidad positiva o negativa. Usualmente, cuando se realizan cálculos no importa mucho el signo del error, sino que su valor absoluto porcentual sea menor que una tolerancia porcentual prefijada $\varepsilon_{s\%}$. Esta última recibe el nombre de **criterio de paro** indicando que un cálculo iterativo culmina cuando $|\varepsilon_{a\%}| < \varepsilon_s$. Por último, se considera que los resultados numéricos presentados en este libro (inclusive sus errores) por simplicidad se presentarán con 3 y 4 cifras significativas.

Ejemplo 1.1**Errores en una aproximación**

Frecuentemente en matemáticas las funciones se representan mediante series infinitas. Por ejemplo, la función e^x se calcula usando:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots + \frac{x^n}{n!}$$

Así cuantos más términos se le adicionen a la serie la aproximación será cada vez más una mejor estimación del valor verdadero de e^x . La expansión de la función e^x se conoce como **expansión en serie de Maclaurin**. Teniendo en cuenta lo anterior aproxime $e^{0.5}$ utilizando series de Maclaurin hasta que $|\varepsilon_a\%| < 1.5$. También proceda a calcular $|\varepsilon_t\%|$ considerando como valor real $e^{0.5} = 1.648721$.

Paso I: Problema matemático. Aproximar $e^{0.5}$ empleando

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots + \frac{x^n}{n!}$$

Paso II: Realizar cada una de las aproximaciones.

En la primera estimación, tomar el primer término de la serie y para el cálculo del error verdadero utilice la Ec. 1.4.

$$e^{0.5} \approx 1 \quad \text{con} \quad |\varepsilon_t\%| = \left| \frac{1.648721 - 1}{1.648721} \right| 100\% = 40\%$$

Nótese que el resultado coincide con el valor real en una cifra significativa. No se calcula el error aproximado porque no se tiene una cantidad previa con la cual se pueda comparar.

En la segunda aproximación, tomar dos términos de la serie (reemplace en la serie el valor $x = 0.5$) y para el cálculo del error aproximado porcentual utilice la Ec. 1.6

$$e^{0.5} \approx 1 + 0.5 = 1.5 \quad \text{con} \quad \begin{aligned} |\varepsilon_{t\%}| &= \left| \frac{1.648721 - 1.5}{1.648721} \right| 100\% = 9.0\% \\ |\varepsilon_{a\%}| &= \left| \frac{1.5 - 1}{1.5} \right| 100\% = 33.3\% \end{aligned}$$

El valor de $\varepsilon_{t\%}$ disminuye considerablemente. Así que se procede a calcular $|\varepsilon_{a\%}|$ porque ya se cuenta con una aproximación previa. El resultado coincide con una cifra significativa y con una segunda cifra próxima a la del valor real.

En la tercera aproximación, tomar tres términos de la serie:

$$e^{0.5} \approx 1 + 0.5 + \frac{(0.5)^2}{2!} = 1.625 \quad \text{con} \quad \begin{aligned} |\varepsilon_{t\%}| &= \left| \frac{1.648721 - 1.625}{1.648721} \right| 100\% = 1.44\% \\ |\varepsilon_{a\%}| &= \left| \frac{1.625 - 1.5}{1.625} \right| 100\% = 7.69\% \end{aligned}$$

El valor de $\varepsilon_{t\%}$ y $\varepsilon_{a\%}$ disminuye considerablemente. El resultado coincide con dos cifras significativas.

En la cuarta aproximación, tomar cuatro términos de la serie:

$$e^{0.5} \approx 1 + 0.5 + \frac{(0.5)^2}{2!} + \frac{(0.5)^3}{3!} \approx 1.646 \quad \text{con} \quad \begin{aligned} |\varepsilon_{t\%}| &= \left| \frac{1.648721 - 1.646}{1.648721} \right| 100\% = 0.175\% \\ |\varepsilon_{a\%}| &= \left| \frac{1.646 - 1.625}{1.646} \right| 100\% = 1.265\% \end{aligned}$$

El cálculo termina dado que $|\varepsilon_{a\%}| = 1.265\% < 1.5\%$. El resultado coincide con tres cifras significativas.

De los resultados se puede concluir que:

- Los errores de truncamiento están presentes dado que se emplea la aproximación de la serie de Maclaurin para aproximar el valor exacto de la función e^x en $x = 0.5$.
- Los errores de redondeo se comienzan a presentar a partir de la cuarta iteración puesto que el resultado se muestra con cuatro cifras significativas. Los resultados

de los errores presentan error de redondeo puesto que se ha utilizado un número finito para el valor de $e^{0.5} = 1.648721$.

- Comúnmente los errores numéricos deben presentarse con la misma cantidad de cifras significativas que los resultados numéricos de las aproximaciones.
- A medida que se suman términos de la serie el valor aproximado se acerca al valor real. Los resultados comienzan a coincidir con más cifras significativas. Por lo tanto, los errores numéricos disminuyen y el resultado numérico converge al valor exacto.

Paso III: Representación gráfica. La Fig. 1.3 muestra en una hoja de cálculo Excel los resultados numéricos de la aproximación del valor de e^x para $x = 5$. No solo se observa el valor para un punto, sino para 11 de ellos en el intervalo $[0,1]$. Nótese que se presentan los errores porcentuales para cada valor. La gráfica muestra cómo a medida que se incrementan términos de la serie el resultado converge al valor real.

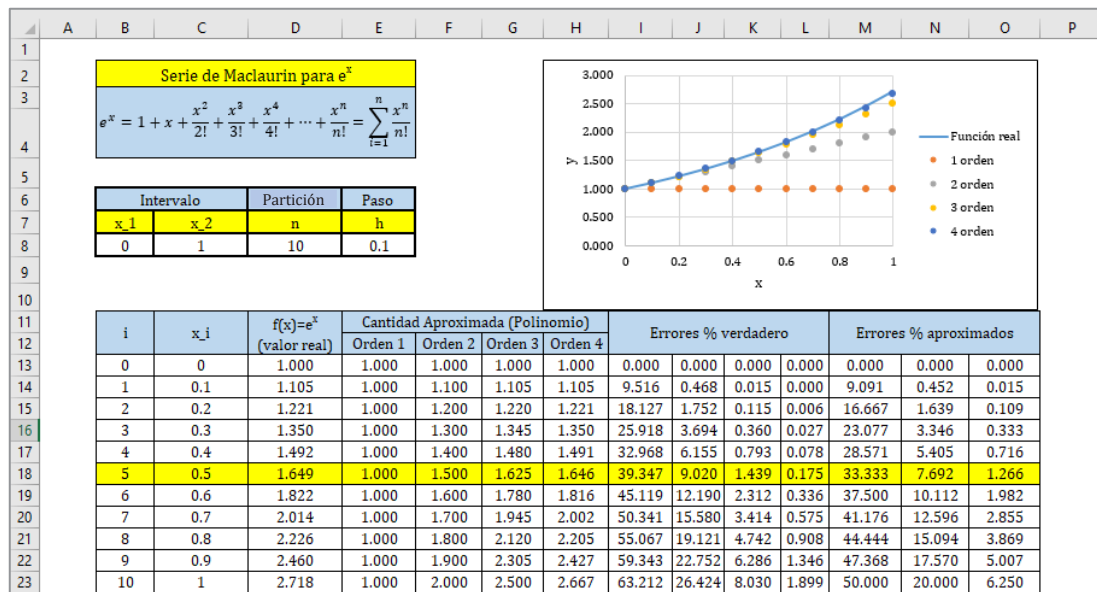


FIGURA 1.3. Aproximación de e^x por una serie de Maclaurin. La tabla de datos y el gráfico se realizó con la hoja de cálculo Excel.

1.5 Hoja de cálculo Excel en los métodos numéricos

Microsoft Excel es una aplicación distribuida por Microsoft office para hojas de cálculo. Estas últimas son un tipo especial de software para matemáticas que permite al usuario ingresar y realizar cálculos en renglones y columnas de datos (Matriz). Excel cuenta con varios recursos numéricos interconstruidos como resolución de ecuaciones, ajuste de curvas y optimización. También permite hacer cálculos de operaciones con matrices y tiene programada funciones especiales como por ejemplo la distribución normal. Aún más, tiene varias herramientas para la visualización como diagramas y gráficas bidimensionales, que son un valioso complemento para el análisis numérico. Otro aspecto importante de la hoja de cálculo Excel es ser un software de fácil acceso y que además no requiere de muchos recursos de un computador para su ejecución.

Desde una perspectiva pedagógica sirve como recurso favorable y óptimo, permite no solo resolver un problema sino analizarlo, variar sus parámetros y comparar los resultados obtenidos, lo cual es de suma importancia en el proceso de enseñanza debido a que así se evita el aprendizaje memorístico o por repetición y a su vez se estimula el aprendizaje reflexivo, al hacer que el estudiante ponga en marcha los procesos básicos del pensamiento y pueda de esta manera afianzar sus conocimientos, desarrollando habilidades que le permitan no solo llegar a la solución del problema sino reflexionar acerca de las posibles soluciones así como de los resultados que se obtendrían en condiciones diferentes. A manera de ilustrar las potencialidades de Excel, se presenta la inserción de la función cuadrática, siendo la misma de gran importancia en ciencias e ingeniería.

Ejemplo 1.2

Gráfica de la función cuadrática en Excel

La función cuadrática

$$f(x) = ax^2 + bx + c \quad \text{con } a \neq 0$$

matemáticamente viene dada por un polinomio de grado 2 y su representación gráfica corresponde a una parábola. El coeficiente a controla la concavidad de la parábola, es decir si $a < 0$ la parábola abre hacia abajo (cóncava hacia abajo) pero si $a > 0$ la parábola abre hacia arriba (cóncava hacia arriba). El coeficiente c controla la altura de la parábola; más específicamente, es la altura de la parábola donde se intercepta al eje y . Los coeficientes b y a controlan conjuntamente la ubicación del eje de simetría de la parábola. Este eje pasa por un punto llamado vértice que tiene como localización $[-b/2a, f(-b/2a)]$. Por último, los valores de los tres coeficientes a, b y c determinan si la parábola corta con el eje x , es decir sus raíces, mediante la fórmula:

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad \text{con } a \neq 0$$

donde si el discriminante $D = b^2 - 4ac > 0$ la parábola corta en dos puntos sobre el eje x (dos raíces), si $D = 0$ corta en un solo punto sobre el eje x y si $D < 0$ no corta en ningún punto sobre el eje x . A partir de esta información elabore una hoja de cálculo Excel donde al ingresar los valores de los coeficientes se observen todas estas propiedades de la parábola con su respectiva gráfica. Esta última defina arbitrariamente un intervalo cerrado $[x_1, x_2]$, siendo la distancia entre los valores adyacentes de x equivalente a $h = (x_1 - x_2)/n$, con n el número de puntos a considerar.

:

✖

✓

f_x

A

B

C

D

E

F

G

H

I

J

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

19

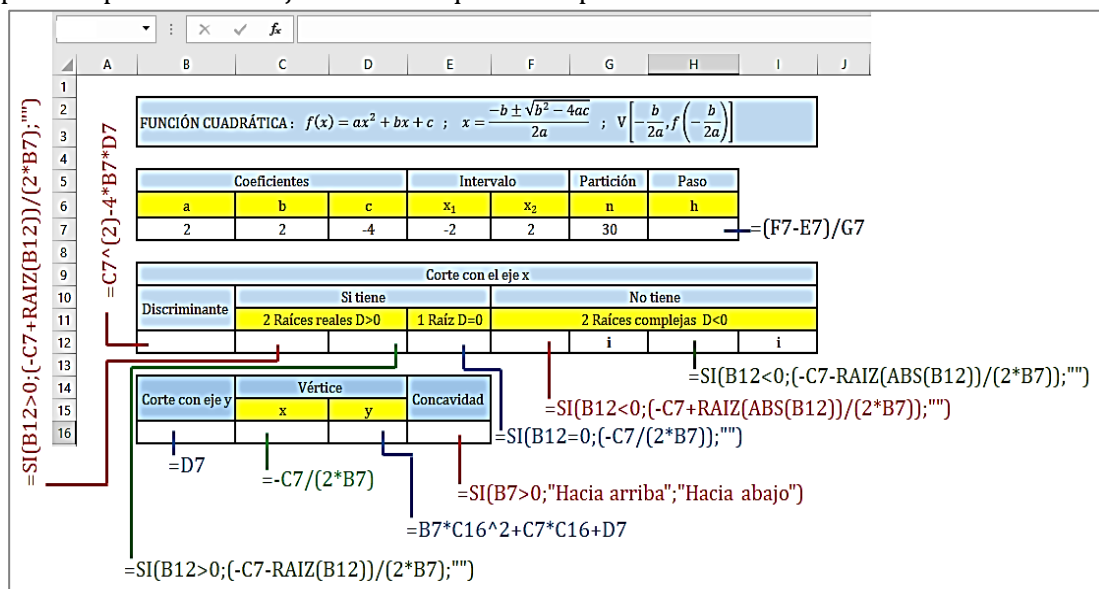
20

21

FIGURA 1.4. Diseño particular de una hoja de cálculo Excel para el estudio de la parábola.

Paso I: Diseño de la hoja de cálculo. La Fig. 1.4 muestra un diseño particular en una hoja de cálculo Excel para efectuar el estudio de la parábola. Los valores de entrada corresponden a los coeficientes, el intervalo y el número de puntos. El resto corresponde a valores de salida que se obtienen con la inserción de fórmulas.

Paso II: Inserción de fórmulas. La Fig. 1.5 muestra todas las fórmulas que deben ser insertadas en cada una de las celdas que proporcionan los valores de salida. En el caso de las raíces y la concavidad las mismas deben colocarse con sentencias lógicas por el uso de desigualdades. Cada una de las fórmulas presentadas tienen que ser insertadas en la parte superior de la hoja de cálculo que corresponde a **la barra de fórmulas**.

**FIGURA 1.5.** Inserción de fórmulas en la hoja de cálculo Excel.

Paso III: Hacer la tabla de valores para realizar la gráfica. La Fig. 1.6 muestra los valores de salida que definen la característica de la parábola producto de la inserción de fórmulas en el paso anterior. La consistencia de los resultados puede verificarse con la gráfica. Asimismo, la Fig. 1.6 muestra las fórmulas que deben insertarse para realizar la gráfica. Nótese que solo deben insertarse valores en las dos primeras filas y luego solo se usa la opción de arrastre de Excel.

Paso IV: Seleccionar los valores de la tabla y emplear la opción de insertar gráfico en Excel. La Fig. 1.7 muestra el diseño de la hoja de cálculo en Excel para el análisis de la parábola. Nótese que la configuración permite variar los coeficientes y ajustar el dominio ilustrando de forma visual el comportamiento numérico y gráfico de la solución. Los puntos resaltados en el gráfico son consistentes con los valores obtenidos consolidando así la veracidad del diseño.

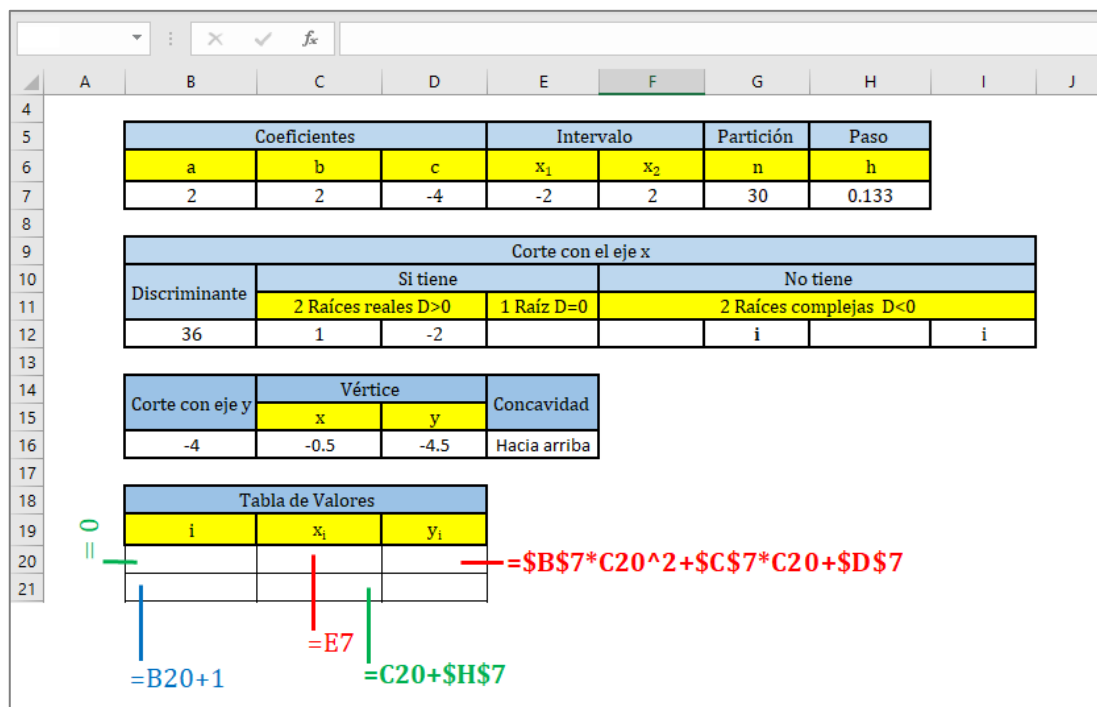


FIGURA 1.6. Inserción de fórmulas para realizar tabla de datos de valores de graficas en Excel.

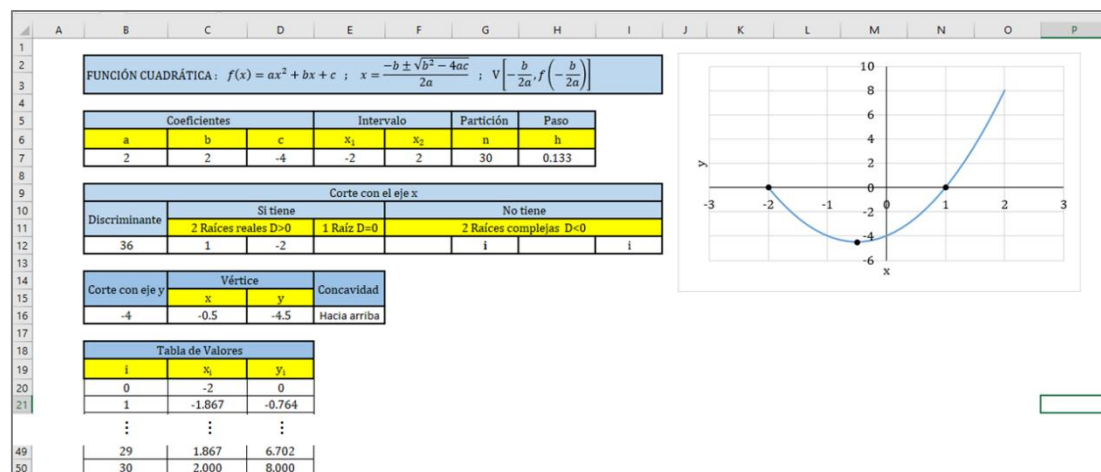


FIGURA 1.7. Diseño en hoja de cálculo Excel para el estudio de la parábola.

Por último, se destaca que el propósito del ejemplo desarrollado, además de mostrar la utilidad y el potencial de Excel, es observar que la realización de gráficas es fundamental para el desarrollo de problemas de análisis numéricos y su entendimiento. Muchos problemas parten de un gráfico y es vital que el lector pueda aprender la forma adecuada de usar Excel para realizar los mismos. Es por ello que la sección dedicada a ejercicios propuestos esta direccionada a la elaboración de gráficos. Los pasos para realizarlo son similares a los presentados anteriormente.

1.6 Los métodos numéricos en la Ingeniería Ambiental

En primera instancia pareciera no haber alguna afinidad entre la matemática y el medio ambiente. Los conceptos de cálculo numérico no se encuentran de forma explícita en palabras claves como “ambiente, naturaleza, cuidado y preservación” sin embargo, por medio de la enseñanza de esta disciplina los estudiantes pueden reflexionar acerca de los múltiples problemas ambientales que tienen origen en agentes fisicoquímicos como la radiación, el sonido, el calor y los fenómenos de transporte de materia y energía. Dada la complejidad de dichos agentes, la matemática contribuye en la búsqueda de un modelo que los describa y así mismo facilite su estudio. En este contexto, diversas situaciones en ingeniería ambiental pueden escribirse en términos de un modelo matemático, por ejemplo:

- Diseño de sistemas de tratamiento de residuos para cumplir con estándares de calidad del agua a bajo costo.
- Planeación de obras para el abastecimiento de agua como presas que permitan disminuir daños por inundación mientras se obtiene la máxima potencia hidráulica.
- Análisis de datos climáticos para generar modelos predictivos del cambio climático y así obtener resultados que permitan evaluar sus impactos de los resultados evaluar sus impactos.

- Cálculo de acumulación de contaminantes y transporte de los mismos a lo largo de caudales y de la atmósfera.
- Modelos para dinámicas de población de especies sometidas a sus interacciones con otras y con el medio ambiente.

Es así como los métodos numéricos les permiten a los estudiantes conocer la aplicación de las matemáticas en el cuidado y protección del medio ambiente. Por consiguiente y en víspera de lograr e incentivar el objetivo anterior durante el desarrollo del libro, se observará que todos los ejemplos resueltos y propuestos están relacionados o tienen alguna afinidad con problemas de modelización de interés en el campo de la ingeniería ambiental. Para finalizar, cabe resaltar que los métodos numéricos son un medio para reforzar la comprensión de las matemáticas ya que una de sus funciones es convertir las matemáticas superiores en operaciones aritméticas básicas y de esta manera profundizar en los temas que de otro modo resultarían complejos. Esta perspectiva dará como resultado un aumento de su capacidad de comprensión y entendimiento en la materia.

1.7 Ejercicios propuestos

Observación:

- Resolver cada uno de los ejercicios planteados haciendo uso de la hoja de cálculo Excel.
- Al realizar cada gráfico se debe presentar la opción de ajustar el intervalo, el número de puntos y el incremento. Tomar como mínimo 50 puntos.

1.- Aproximar mediante una serie de Maclaurin el valor de $\cos x$ en el intervalo $[0, \pi/4]$ para un total de 10 puntos espaciados a la misma hasta que $|\varepsilon_{a\%}| < 0.01$. Posteriormente calcular $|\varepsilon_{t\%}|$ considerando como valor real el de la función coseno dada por Excel para cada uno de los puntos del intervalo. Por último, graficar la función y en el mismo plano cartesiano graficar las aproximaciones para poder apreciar la convergencia de las misma a la función real.

Nota: La función coseno en términos de serie de Maclaurin viene dada por:

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + \frac{x^{2n}}{(2n)!}$$

2.- Aproximar mediante una serie de Maclaurin el valor de $\tan^{-1}x$ en el intervalo $[0, \pi/6]$ para un total de 10 puntos espaciados a la misma hasta que $|\varepsilon_a\%| < 0.5$. Posteriormente calcular $|\varepsilon_t\%|$ considerando como valor real el de la función arcotangente dada por Excel para cada uno de los puntos del intervalo. Por último, graficar la función y en el mismo plano cartesiano graficar las aproximaciones para poder apreciar la convergencia de las misma a la función real.

Nota: La función arcotangente en términos de serie de Maclaurin viene dada por:

$$\tan^{-1}x = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \frac{x^7}{7} + \cdots + \frac{x^{2n+1}}{2n+1}$$

3.- Diversos problemas de la ingeniería ambiental (inclusive de casi todos los campos de la ciencias e ingeniería) desde crecimientos poblacionales, incrementos de C_{O_2} en la atmósfera y de residuos de una comunidad hasta consumos de energía, entre otros, tienen una tendencia lineal entre la relación de sus variables. La línea recta es la gráfica de la función

$$y(x) = ax + b$$

El coeficiente a es la pendiente o inclinación de la recta y b determina el corte de la recta con el eje vertical y . En otras de sus características se tiene que $a > 0$ la pendiente es positiva (creciente) y $a < 0$ la pendiente es negativa (decreciente) y el corte con el eje $x = -b/a$.

- a) Graficar la línea recta. Dados a y b indicar los cortes con los ejes y el crecimiento de la gráfica.



Central eléctrica en China. Por su alto nivel de industrialización, China es el país que más contamina el aire del planeta. El observatorio de Mauna Loa, Hawaii, registra la concentración de dióxido de carbono (en partes por millón) en la atmósfera terrestre desde 1960. Acorde a sus mediciones los modelos lineal y cuadrático proporcionan un buen ajuste sobre la tendencia del incremento del C_{O_2} . Las predicciones de los modelos indican que para el año 2035 las cantidades de C_{O_2} superarían 425 ppm, cifras alarmantes para el medio ambiente de nuestro planeta. Fotografía: Kevin Frayer (BBC News Mundo).

- b) Analizar los efectos de los valores de a y b sobre la gráfica.
- c) Investigar algunos modelos de problemas de ingeniería ambiental que se ajustan a una función lineal.

4.- La curva logística es ampliamente utilizada en la ingeniería ambiental para estudiar las dinámicas de poblaciones bajo el efecto de **capacidad de persistencia** (límite superior que las condiciones medioambientales imponen al tamaño de poblaciones y comunidades) (Mihelcic y Zimmerman, 2012). La curva logística es la gráfica de la siguiente función

$$y(x) = \frac{L}{1 + be^{-kx}}$$

siendo y = el número de individuos, x = tiempo, L = la capacidad límite o de soporte, k = tasa de crecimiento o pendiente de la curva y b = constante.

- a) Graficar la curva logística a partir de $x \geq 0$.
- b) Analizar los efectos de los valores de L , k y b sobre la gráfica.
- c) Indicar que sucede con el número de individuos para un tiempo largo.



Zona de refugio de alces Jackson Hole, Wyoming, ubicado entre el Yellowstone National Park y el Grand Teton National Park, al noroeste de Wyoming (Estados Unidos). El modelo logístico de crecimiento poblacional se ajusta a muchas poblaciones naturales en zonas de refugio. Es un modelo útil, pero simplifica la dinámica de una población en el mundo real. En este la capacidad de persistencia del ambiente no cambia lo cual en la realidad no es cierto dado que esta varía anualmente por los cambios de clima, los eventos naturales y la interacción de las especies con otras al competir por los mismos recursos. Estos factores también son relevantes para entender cómo crece una población. Fotografía: Jennifer Lubell (VisitTheUsa.mx).

5.- En la ingeniería ambiental las **reacciones enzimáticas** (cinética enzimática) se utilizan mucho para caracterizar reacciones mediadas biológicamente. Un modelo para reacciones enzimáticas viene dado por:

$$y(x) = \frac{kx^3}{K + x^3}$$

siendo y = tasa inicial de reacción, x = concentración del sustrato y las constantes k y K .

- a) Graficar el modelo a partir de $x \geq 0$.
- b) Analizar los efectos de los valores de k y K sobre la gráfica.

- c) Indicar que sucede con la tasa de reacción para valores elevados de concentración.
- d) Investigar sobre los procesos enzimáticos en el medio ambiente.

6.- Las funciones trigonométricas son ampliamente utilizadas para estudiar fenómenos que se repiten de forma periódica como por ejemplo precipitaciones, cambios de temperatura, vibraciones entre otros. Un modelo ampliamente utilizado para las temperaturas máximas y mínimas anuales de ciertas regiones viene dado por la curva senoide del gráfico de la siguiente función:

$$y(x) = A + C \sin\left(\frac{2\pi}{T}x + \varphi\right)$$

siendo y = la temperatura, x = tiempo, A = valor medio (establece la altura promedio sobre las abscisas), C = altura de oscilación, T = Periodo y φ = corrimiento de fase (parametriza en que extensión de la senoide está corrida horizontalmente).

- a) Graficar la curva sinusoidal a partir de $x \geq 0$.
- b) Analizar los efectos de los valores de A, C, T y φ sobre la gráfica.
- c) Indicar que determina los puntos óptimos de la función.



Ciudad de Miami Beach (Estados Unidos). Miami es el destino de muchos turistas debido a sus hermosas playas y cálido clima. Según los datos de temperatura máxima y mínima anuales de la ciudad proporcionados por National Centers for Environmental Information (NOAA) un modelo que proporciona un buen ajuste es el sinusoidal. Los datos de temperatura sobre nuestro planeta a lo largo de los años son arduamente analizados por la comunidad científica para estudiar el cambio climático. *Fotografía: Infobae.*

7.- En la modelización superficial de la calidad del agua una variable de gran interés es **la demanda bioquímica de oxígeno** (medida indirecta de la cantidad de materia orgánica biodegradable presente en el agua). En este sentido se tiene que un modelo para la demanda bioquímica de oxígeno remanente (DBO) y un modelo para la demanda bioquímica de oxígeno ejercida (DBO_t) vienen dada por (Pazmiño, 2020):

$$DBO = L_0 e^{-kx} \quad ; \quad DBO_t(x) = L_0(1 - e^{-kx})$$

respectivamente. Siendo x = tiempo transcurrido en la reacción, L_0 = es la demanda bioquímica de oxígeno última o final y k = constante que define la tasa a la que se produce la reacción de oxidación.

- Graficar en un mismo plano DBO y DBO_t a partir de $x \geq 0$.
- Analizar los efectos de los valores de L_0 y k sobre las gráficas.
- Indicar que sucede con la DBO y DBO_t para tiempos elevados desde la reacción.
- Profundizar sobre DBO y DBO_t en el estudio de la modelización superficial de la calidad del agua.

8.- Al realizar estudios estadísticos de variables ambientales comúnmente aparece la función de distribución normal o distribución de Gauss:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(x-\mu)^2/(2\sigma^2)}$$

siendo $f(x)$ = la densidad de probabilidad, x = variable aleatoria, μ = la media aritmética, σ = la desviación típica y σ^2 = es la varianza. La gráfica de la función es una curva en forma de campana, donde el valor de μ controla la ubicación del eje de simetría y σ controla la altura y anchura de la misma.

- Graficar la curva de campana en $x_1 \leq x \leq x_2$.
- Analizar los efectos de los valores de μ y σ sobre la gráfica.
- Indicar el punto óptimo.
- Indicar que sucede con la función para valores grandes de x tanto negativos como positivos.
- Investigar algunos modelos de problemas de ingeniería ambiental que se ajustan a la distribución normal.

9.- Como parte de un estudio de abastecimiento de agua para cierta comunidad se diseña un tanque cilíndrico de longitud L , radio R . El tanque está totalmente lleno de agua, se dispone horizontalmente y en el fondo tiene un orificio circular de diámetro φ . Se abre el orificio y comienza a salir agua por el mismo tal y como muestra la Fig.1.8. El nivel de agua h como función del tiempo x viene dado por:

$$h(x) = 2R - \sqrt[3]{\frac{9gk^2\varphi^4}{128L^2}}x^2 \quad \text{en} \quad 0 \leq x \leq x_v, \text{ con } x_v = \frac{L}{k\varphi^2} \sqrt{\frac{1024R^3}{9g}}$$

siendo k = un parámetro relacionado con la geometría del orificio, para un orificio circular $k = 0.6$, y x_v = el tiempo que le toma al tanque vaciarse.

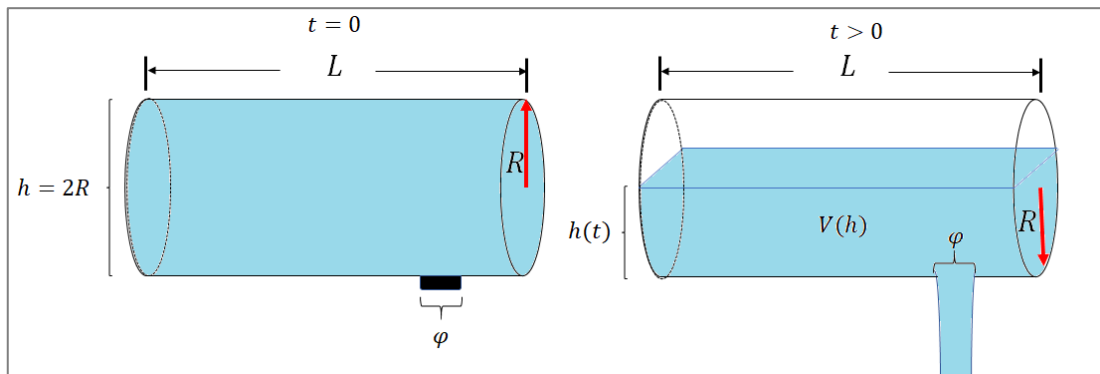


FIGURA 1.8. Volumen y nivel de agua de un tanque cilíndrico.

- Graficar $h(x)$ en el intervalo $[0, x_v]$
- Analizar los efectos de los valores de L , k , R y φ sobre el nivel del agua.
- Indicar en una celda el tiempo de vaciado.

10.- Usted como ingeniero ambiental está proponiendo un programa de manejo de recursos hídricos. Parte del proyecto consiste en el diseño de un tanque cilíndrico para almacenar agua de un poblado pequeño en un país en desarrollo como muestra la Fig.1.8. El volumen de líquido que puede contener viene dado por

$$V(h) = L \cos^{-1} \left(\frac{R-h}{R} \right) R^2 - (R-h) \sqrt{2Rh - h^2} \quad \text{en} \quad 0 \leq h \leq 2R$$

- Graficar $V(h)$ en el intervalo $[0, 2R]$
- Analizar los efectos de los valores de R sobre el volumen de agua.
- Indicar que porcentajes de volumen de agua queda cuando el nivel de agua toma los valores de $2R, 3R/2, R, R/2$ y 0 .

1.8 Proyecto para grupo: Modelo simple de disolución.

Los problemas de dilución juegan un papel importante en el estudio de la modelización de la calidad de agua y aire puesto que permiten estudiar la tasa de acumulación de contaminantes. La Fig. 1.9 muestra un sistema que consiste en un tanque que inicialmente en $t = 0$ tiene un volumen V_0 de agua (solvente) y una cantidad de sustancia disuelta (soluto), como por ejemplo cloro, A_0 . Para un $t > 0$ se abren las válvulas y entra agua bien mezclada (cloro) al tanque con una velocidad v_1 y concentración c_1 , posteriormente por la otra válvula sale agua bien mezclada del tanque con una velocidad v_2 . La cantidad $A(t)$, de cloro, que se va acumulando en el tanque a lo largo del tiempo viene dado por:

$$A(t) = \begin{cases} A(t) = c_1 v_1 t + A_0 & \text{si } v_2 = 0 \\ A(t) = c_1 V_0 + (A_0 - c_1 V_0) e^{-v_1 t / V_0} & \text{si } v_1 = v_2 \\ A(t) = c_1 [V_0 + (v_1 - v_2)t] + (A_0 - c_1 V_0) [1 - (v_1 - v_2 / V_0)t]^{v_2 / (v_2 - v_1)} & \text{si } v_1 \neq v_2 \end{cases}$$

la acumulación está condicionada con la relación de las velocidades de entrada y salida del líquido del tanque. Para este modelo

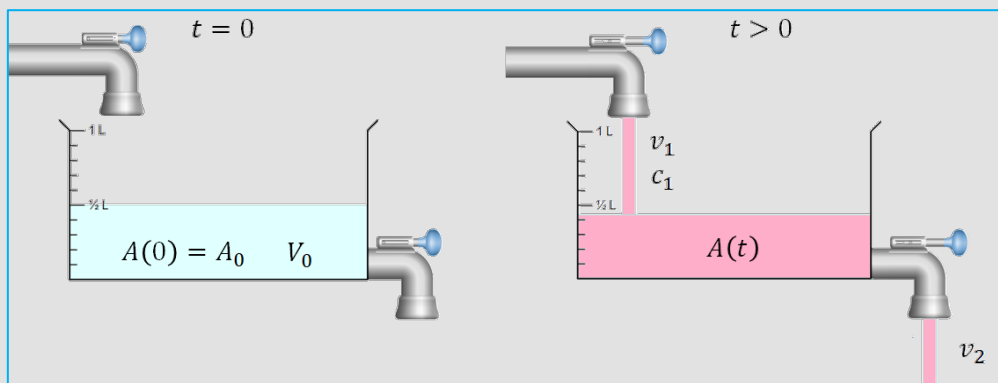


FIGURA 1.9. Escenario de disolución. Imagen tomada de simulaciones interactivas PHET.

- Graficar $A(t)$ para $t \geq 0$. El diseño de la hoja debe permitir ajustar los parámetros.
- Analizar los efectos de los valores de c_1 , v_1 , v_2 , V_0 y A_0 sobre la acumulación del cloro dentro del tanque.
- Estudiar el comportamiento de $A(t)$ para períodos largos de tiempo en las tres condiciones dadas. ¿Qué concluye de cada uno de los resultados?
- Investigar los distintos tipos de escenarios para los que puede emplearse el modelo de acumulación de contaminantes en ciertos espacios contenidos con fluidos.

CAPÍTULO 2

RAÍCES DE ECUACIONES Y PUNTOS ÓPTIMOS

En este capítulo se estudiarán las técnicas numéricas que permiten encontrar las raíces o ceros de una función y los puntos óptimos, aquellos donde la función se maximiza o minimiza.

2.1. Solución numérica de ecuaciones de una variable.

2.2. Método gráfico.

2.3. Métodos cerrados.

2.4. Métodos abiertos.

2.5. Puntos óptimos.

2.6. Valores máximos y mínimos.

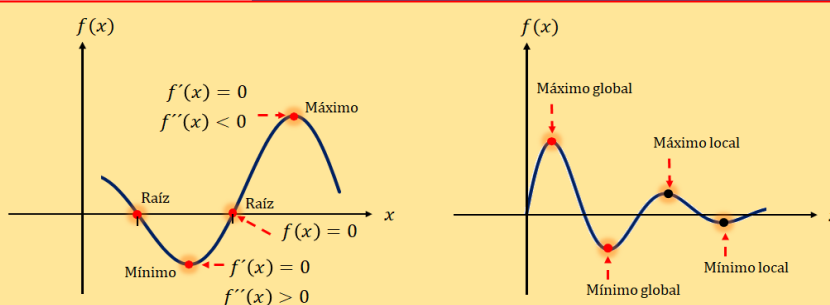
2.7. Ejercicio de aplicación: Cálculo de niveles de oxígeno.

2.8. Ejercicios propuestos.

2.9. Proyecto para grupo: El pH del agua.



Los niveles de oxígeno en la corriente de un río son vitales para ciertas especies de pesca deportiva como la trucha y el salmón. En la sección 2.7 se presentará un modelo matemático empleado en ingeniería ambiental que evidencia como el cálculo de raíces y puntos óptimos permite estimar los niveles de oxígeno en distancias aguas abajo en la corriente de un río. **Fotografía:** Pescador deportivo (Agua).



Raíces de una función y puntos óptimos.

2.1 Solución numérica de ecuaciones de una variable

Sea una función $f(x)$ y su gráfica como muestra la Fig.2.1. Los puntos x tal que $f(x) = 0$ se les conoce como **raíces**. Calcular las raíces de una función $f(x)$ se resume a encontrar la solución de una ecuación $f(x) = 0$, es por ello que a las raíces se les conoce como los ceros de una ecuación (Chapra y Canale, 2007).

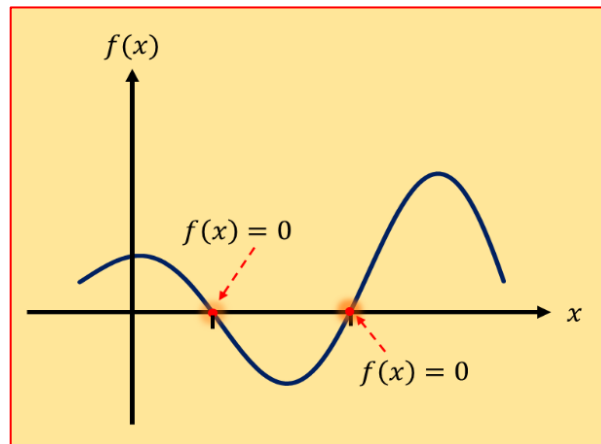


FIGURA 2.1. Raíces de una función.

Acorde a la estructura de la función las raíces pueden ser obtenidas con métodos directos, obteniéndose soluciones exactas, por ejemplo, para una función cuadrática

$$f(x) = ax^2 + bx + c = 0, \text{ si } x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \text{ con } a \neq 0. \quad (2.1)$$

Siendo a, b y c los coeficientes. No obstante, existen muchas funciones donde calcular la raíz no es trivial y en algunos casos obtener una solución por métodos algebraicos es imposible. Por ejemplo, las funciones trascendentes tan simples como:

$$f(x) = e^{-x} - x, \quad f(x) = x \ln(x + 1) - 1 \quad \text{y} \quad f(x) = \sin 10x + \cos 3x.$$

Para estos casos se debe apelar a técnicas de aproximación numéricas.

2.2 Método gráfico

El método gráfico consiste en la observación directa para aproximar una raíz visualizando la gráfica. Para la construcción de la misma se emplean graficadores, sino se dispone de uno se pueden bosquejar haciendo uso de las herramientas del cálculo diferencial o construyendo simplemente una tabla de datos.

Ejemplo 2.1

Temperatura en la ciudad de Miami

La temperatura es uno de los elementos del clima que permite determinar el tiempo atmosférico en una región. En la ciudad de Miami la temperatura (en grados Fahrenheit) anual viene dada por la siguiente modelo:

$$T(t) = 83.70 + 7.46 \sin(0.4912t - 1.95) \quad \text{con } 1 \leq t \leq 12$$

con $t = 1$ correspondiente al mes de enero (Larson y Edwards, 2010). ¿Para qué valor de t la temperatura alcanza el valor de 77.5°F ? y partiendo del valor de t señale ¿a qué mes y semana corresponde?

Sugerencia: Tome en cuenta que la parte entera representa el mes y la parte decimal la semana.

Paso I: Problema matemático. Dado

$$T(t) = 83.70 + 7.46 \sin(0.4912t - 1.95).$$

Haciendo $x = t$ y reemplazar $T = 77.5$ se tiene

$$\begin{aligned} 77.5 &= 83.70 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95) \\ 0 &= 83.70 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95) - 77.5 \\ f(x) &= 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95) \end{aligned}$$

el problema se reduce a determinar el valor de x tal que $f(x) = 0$.

Paso II: Hacer la gráfica construyendo una tabla de datos o empleando un graficador

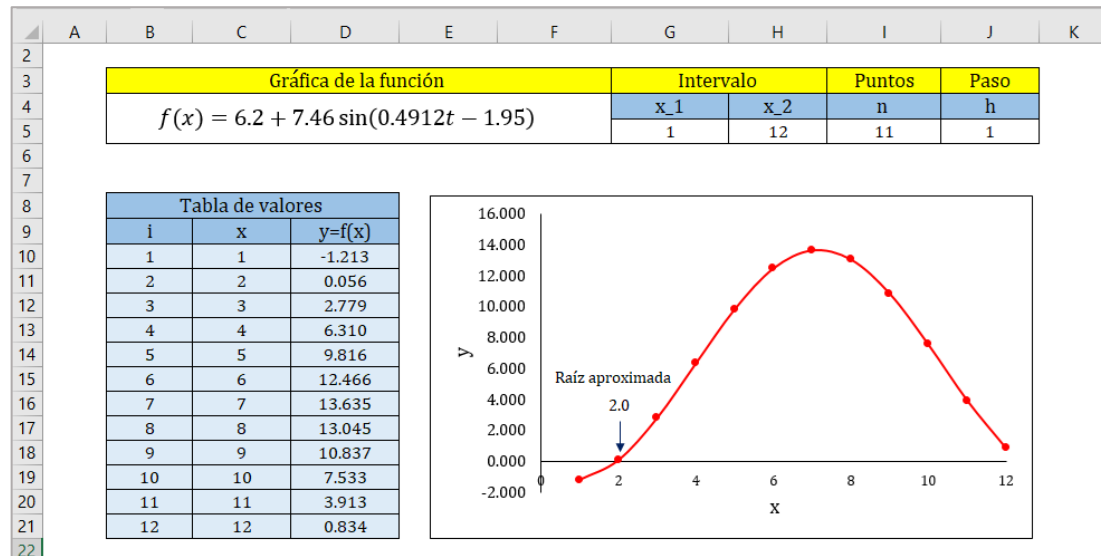


FIGURA 2.2. Aplicación de una hoja de cálculo para graficar la función $f(x) = 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$.

La tabla de datos y el gráfico se realizó con la hoja de cálculo Excel

La Fig. 2.2, muestra la tabla de datos y la gráfica de la función mediante una hoja de cálculo en Excel. Por observación directa del gráfico el valor estimado de x tal que $f(x) = 0$ corresponde a $x = 2.0$. Ahora bien, con el objetivo de cuantificar el error verdadero en la aproximación, se tiene que al emplear métodos algebraicos en la siguiente ecuación:

$$6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95) = 0$$

resolviendo para x se desprende:

$$x = \frac{1}{0.4912} \left[\sin^{-1} \left(-\frac{6.2}{7.46} \right) + 1.95 \right] = 1.973.$$

Así el error relativo % es:

$$E_{\%} = \left| \frac{1.973 - 2.0}{1.973} \right| 100\% = 1.37\%.$$

Esto que significa que aproximadamente al inicio de la primera semana del mes de febrero $x = t = 2.0$ con una incertidumbre de 1.37%, la temperatura alcanza un valor de

$T = 77.5$ °F. Cabe destacar que este tipo de ejemplo con solución para x exacta permite comparar la exactitud y precisión del método numérico utilizado.

Por último, se resalta que el estudio de temperatura es de gran importancia en el campo de la ingeniería ambiental debido a que esta magnitud determina la distribución de las especies actuando sobre sus ciclos de vida, sus actividades de supervivencia, de reproducción y desarrollo. Por ende, si ella varía todo lo anterior se verá afectado.

2.3 Métodos cerrados

Dada una función $f(x)$ real y continua en el intervalo $[x_i, x_s]$. Si $f(x_i)$ y $f(x_s)$ tienen signos opuestos, esto es, $f(x_i)f(x_s) < 0$ **entonces hay al menos una raíz real** entre x_i y x_s tal y como muestra la Fig.2.3. En efecto los métodos cerrados (que toman un valor inferior x_i y un valor superior x_s que acoten a la raíz x_r) aprovechan esta característica localizando un intervalo en el que la función cambie de signo.

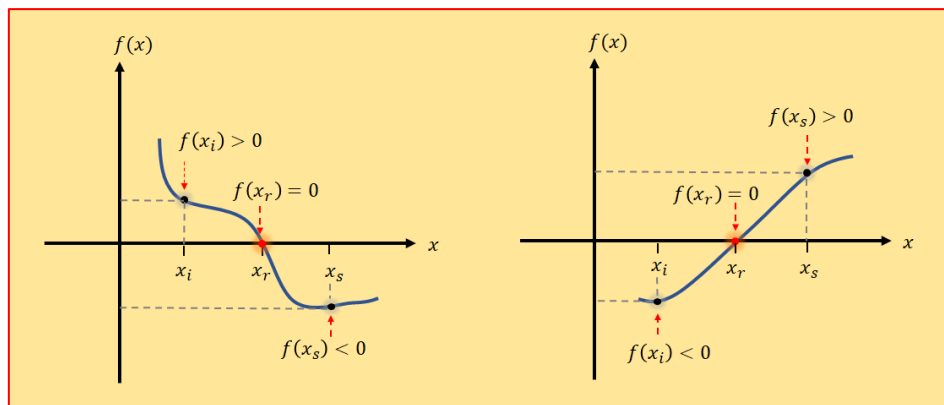


FIGURA 2.3. El método cerrado: cambio de signo al evaluarla en los extremos.

Entonces, la localización del cambio de signo (y en consecuencia el de la raíz) se logra con más exactitud al dividir el intervalo en varios subintervalos. Luego de un proceso de iteración la aproximación a la raíz mejora cada vez más en la medida que los subintervalos se dividen en intervalos cada vez más pequeños. Cabe destacar que de no cumplirse el cambio de signo de la función en ambos lados de la raíz no se

recomienda aplicar el método cerrado. A continuación, se presentan un par de métodos cerrados de gran utilidad en cálculos numéricos de raíces.

2.3.1 Método de bisección

El método de bisección consiste en encerrar a la raíz x_r entre un intervalo $[x_i, x_s]$. El intervalo siempre se divide a la mitad y mediante un proceso de iteración el punto de división del intervalo x_a se aproxima al valor de la raíz tal como muestra la Fig.2.4.

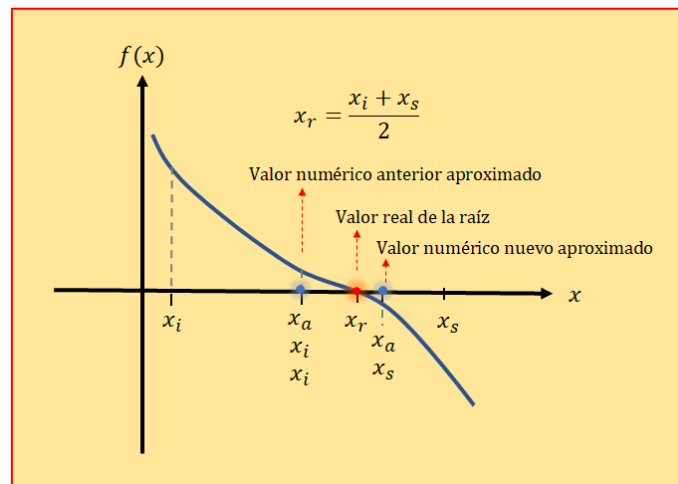


FIGURA 2.4. Aproximación de la raíz por el método de bisección.

El algoritmo para determinar la raíz por el método de bisección se describe a continuación:

1. Elegir límites inferior x_i y límite superior x_s .
2. Proceso de iteración:

$$x_a = \frac{x_i + x_s}{2} \quad \text{si} \quad \begin{cases} f(x_i)f(x_a) < 0, & x_s = x_a \\ f(x_i)f(x_a) > 0, & x_i = x_a \end{cases} \quad (2.2)$$

3. Error aproximado y criterio de paro:

$$\left| \frac{x_a^{\text{nuevo}} - x_a^{\text{anterior}}}{x_a^{\text{nuevo}}} \right| 100\% \leq \epsilon_s. \quad (2.3)$$

Ejemplo 2.2

Temperatura en la ciudad de Miami

Emplear el método de bisección para determinar el valor de t tal que $T = 77.5^\circ F$ del ejemplo 2.1 hasta que el error aproximado sea menor que el criterio de terminación $\epsilon_s = 0.5\%$.

Paso I: Problema matemático. Del ejemplo anterior se desprende que el problema se resume a encontrar la raíz de:

$$f(x) = 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95).$$

Observación: Recuerde que la raíz real es 1.973.

Paso II: Los puntos que acoten a la raíz. Acorde al gráfico de la Fig. 2.2 se toman como valores iniciales a $x_i = 1$ y $x_s = 3$

Paso III: Proceso de iteración empleando el algoritmo de bisección

Primera iteración. Tomados $x_i = 1$ y $x_s = 3$

Raíz aproximada	Función evaluada en x_i y x_a
$x_a = \frac{x_i + x_s}{2}$ $= \frac{1 + 3}{2}$ $x_a = 2$	$f(x_i) = f(1) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(1) - 1.95]$ $= -1.213$ $f(x_a) = f(2) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(2) - 1.95]$ $= 0.056$ $f(x_i)f(x_a) = f(1)f(2) = -0.069 < 0$

Error relativo %

$$E_{\%} = \left| \frac{1.973 - 2.0}{1.973} \right| 100\% = 1.37\%.$$

Segunda iteración. Dado que $f(x_i)f(x_a) < 0$, $x_i = 1$ y $x_s = x_a = 2$

Raíz aproximada	Función evaluada en x_i y x_a
$x_a = \frac{1+2}{2}$	$f(x_i) = f(1) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(1) - 1.95]$ $= -1.213$
$x_a = 1.5$	$f(x_a) = f(1.5) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(1.5) - 1.95]$ $= -0.788$
	$f(x_i)f(x_a) = f(1)f(1.5) = 0.956 > 0$
Error relativo %	Error aproximado %
$E_{\%} = \left \frac{1.973 - 1.5}{1.973} \right 100\% = 33.33\%$	$\epsilon_a = \left \frac{1.5 - 2}{1.5} \right 100\% = 23.97\%$

Tercera iteración. Dado que $f(x_i)f(x_a) > 0$, $x_i = x_a = 1.5$ y $x_s = 2$

Raíz aproximada	Función evaluada en x_i y x_a
$x_a = \frac{1.5+2}{2}$	$f(x_i) = f(1.5) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(1.5) - 1.95]$ $= -0.788$
$x_a = 1.75$	$f(x_a) = f(1.75) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(1.75) - 1.95]$ $= -0.416$
	$f(x_i)f(x_a) = f(1.5)f(1.75) = 0.328 > 0$
Error relativo %	Error aproximado %

$$E_{\%} = \left| \frac{1.973 - 1.75}{1.973} \right| 100\% = 11.30\%$$

$$\epsilon_a = \left| \frac{1.75 - 1.5}{1.75} \right| 100\% = 14.29\%$$

Para simplificar, se tiene que procediendo de manera similar los resultados corresponden a los mostrados en la siguiente figura

1	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	
2	Raíz de la función					Algoritmo de Bisección						
3	$f(x) = 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$					$x_r = \frac{x_i + x_s}{2} \quad \text{si} \quad \begin{matrix} f(x_i)f(x_a) < 0 & , x_f = x_r \\ f(x_i)f(x_a) > 0 & , x_i = x_r \end{matrix}$						
4												
5	Valor verdadero				1.973							
6	Valores iniciales											
7	x_i	1	x_s	3								
8												
9	Procedimiento numérico del método de Bisección											
10	i	x_i	x_s	x_a	f(x_i)	f(x_a)	f(x_i)f(x_a)	E_%	E_a%			
11	1	1	3	2	-1.213	0.056	-0.069	1.368				
12	2	1.000	2.000	1.500	-1.213	-0.788	0.956	23.974	33.333			
13	3	1.500	2.000	1.750	-0.788	-0.416	0.328	11.303	14.286			
14	4	1.750	2.000	1.875	-0.416	-0.192	0.080	4.967	6.667			
15	5	1.875	2.000	1.938	-0.192	-0.071	0.014	1.799	3.226			
16	6	1.938	2.000	1.969	-0.071	-0.008	0.001	0.215	1.587			
17	7	1.969	2.000	1.984	-0.008	0.024	0.000	0.577	0.787			
18	8	1.969	1.984	1.977	-0.008	0.008	0.000	0.181	0.395			
19												
20	x=t	1.977	Raíz aproximada con E_a<0.5%									
21	f(x)	0.008										
22	T(t)	77.508										

FIGURA 2.5. Aplicación de una hoja de cálculo para encontrar la raíz de la función $f(x) = 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$ por el método de bisección. La tabla se realizó con la hoja de cálculo Excel.

La Fig. 2.5 muestra un formato de la hoja de cálculo Excel para desarrollar el algoritmo de bisección. De acuerdo con la tabla presentada se tiene que a 8 iteraciones $\epsilon_a\%$ está por debajo de $\epsilon_s = 0.5\%$, y el cálculo puede terminar. Los resultados muestran que aproximadamente en la última semana del mes de enero $x = t = 1.977$ con una incertidumbre de 0.181% así la temperatura alcanza un valor de $T = 77.5^\circ\text{F}$.

2.3.2 Método de falsa posición

El método de falsa posición consiste en aproximar la raíz de una función mediante el punto de corte de una recta con el eje x que pasa por los puntos $(x_i, f(x_i))$ y $(x_s, f(x_s))$ tal y como se muestra en el gráfico del lado izquierdo de la Fig. 2.6. El hecho de que se aproxime el punto de corte de la curva con el eje x con el punto de

corte obtenido por la recta da una “falsa posición” de la raíz; de aquí el nombre del método. Nótese en el gráfico del lado derecho de Fig. 2.6 que al efectuar un proceso de iteración se generan rectas cuyos puntos de corte con el eje x se aproximan hacia el valor real de la raíz de la función $f(x)$.

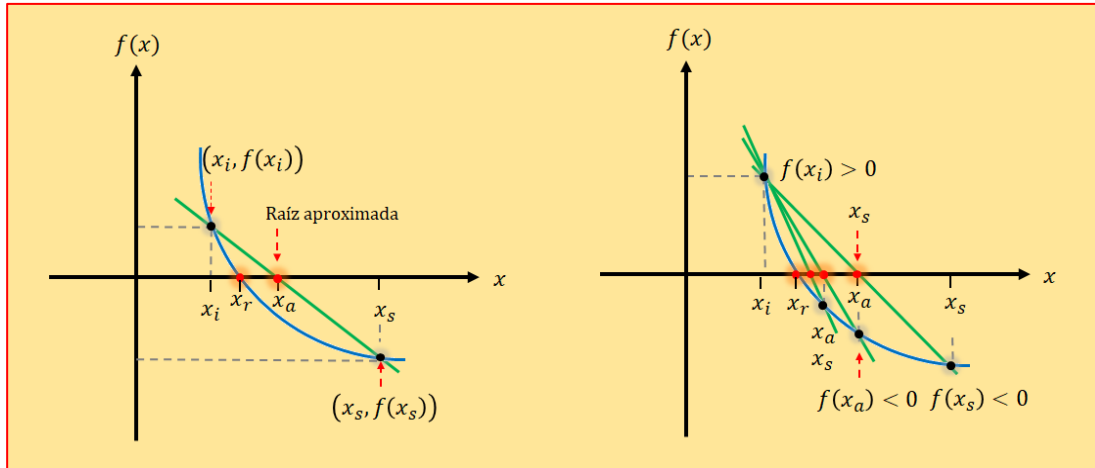


FIGURA 2.6. Aproximación de la raíz por el método de falsa posición.

El algoritmo para determinar la raíz por el método de falsa posición se describe a continuación:

1. Elegir límites inferior x_i y límite superior x_s .
2. Proceso de iteración:

$$x_a = x_s - \frac{f(x_s)(x_i - x_s)}{f(x_i) - f(x_s)} \quad \text{si} \quad \begin{cases} f(x_i)f(x_a) < 0, & x_s = x_a \\ f(x_i)f(x_a) > 0, & x_i = x_a \end{cases} \quad (2.4)$$

3. Error aproximado y criterio de paro (dado en la Ec. 2.3):

$$\left| \frac{x_a^{\text{nuevo}} - x_a^{\text{anterior}}}{x_a^{\text{nuevo}}} \right| 100\% \leq \epsilon_s.$$

El valor de x_a calculado en la Ec. 2.4, reemplazará después a cualquiera de los dos valores iniciales, x_i o x_s , y da un valor de la función con el mismo signo de $f(x_a)$. De esta manera, los valores x_i o x_s siempre encierran la verdadera raíz.

Ejemplo 2.3 Temperatura en la ciudad de Miami

Realizar el ejemplo 2.2 empleando el método de falsa posición.

Paso I: Hacer un bosquejo de la función empleando un graficador, aplicando cálculo o construyendo una tabla de datos. La gráfica se aprecia en la Fig. 2.2.

Paso II: Indicar los puntos que acoten a la raíz. Acorde el gráfico de la Fig. 2.2 se toman como valores iniciales a $x_i = 1$ y $x_s = 3$. Recuerde que la raíz real es 1.973.

Paso III: Proceso de iteración empleando el algoritmo de falsa posición.

Primera iteración. Tomados $x_i = 1$ y $x_s = 3$

Función evaluada en x_i , y x_s	Raíz aproximada
$f(x_i) = f(1) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(1) - 1.95]$ $= -1.213$ $f(x_s) = f(3) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(3) - 1.95]$ $= 2.779$	$x_a = x_s - \frac{f(x_s)(x_i - x_s)}{f(x_i) - f(x_s)}$ $= 3 - \frac{(2.779)(1 - 3)}{-1.213 - 2.779}$ $x_a = 1.608$
Función evaluada en x_r	Condición
$f(x_a) = f(1.608) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(1.608) - 1.95]$ $= -0.640$	$f(x_i)f(x_a) = f(1)f(1.608)$ $= 0.777 > 0$
Error Relativo %	
$E\% = \left \frac{1.973 - 1.608}{1.973} \right 100\% = 18.51$	

Segunda iteración. Dado que $f(x_i)f(x_a) > 0$, $x_i = x_a = 1.608$ y $x_s = 3$

Función evaluada en x_i , y x_s	Raíz aproximada
$f(x_i) = f(1.608) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(1.608) - 1.95]$ $= -0.640$ $f(x_s) = f(3) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(3) - 1.95]$ $= 2.779$	$x_a = x_s - \frac{f(x_s)(x_i - x_s)}{f(x_i) - f(x_s)}$ $= 3 - \frac{(2.779)(1.608 - 3)}{-1.640 - 2.779}$ $x_a = 1.868$
Función evaluada en x_p	Condicional
$f(x_a) = f(1.868) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(1.868) - 1.95]$ $= -0.204$	$f(x_i)f(x_a) = f(1.608)f(1.868)$ $= 0.131 > 0$
Error relativo %	Error aproximado %
$E\% = \left \frac{1.973 - 1.608}{1.973} \right 100\% = 5.30\%$	$\epsilon_a = \left \frac{1.608 - 1.868}{1.608} \right 100\%$ $= 13.95\%$

Si siguiendo el proceso iterativo los resultados corresponden a los presentados en la tabla de la siguiente imagen

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	Raíz de la función				Algoritmo de Falsa Posición							
2	$f(x) = 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$				$x_a = x_s - \frac{f(x_s)(x_i - x_s)}{f(x_i) - f(x_s)} \quad \text{si} \quad \begin{cases} f(x_i)f(x_a) < 0, & x_s = x_a \\ f(x_i)f(x_a) > 0, & x_i = x_a \end{cases}$							
3												
4												
5	Valor verdadero			1.973								
6	Valores iniciales											
7	x_i	1	x_s	3								
8												
9	Procedimiento numérico del método de Falsa Posición											
10	i	x_i	x_s	f(x_i)	f(x_s)	x_a	f(x_a)	f(x_i)f(x_a)	E_%	E_a%		
11	1	1.000	3.000	-1.213	2.779	1.608	-0.640	0.777	18.509			
12	2	1.608	3.000	-0.640	2.779	1.868	-0.204	0.131	5.299	13.949		
13	3	1.868	3.000	-0.204	2.779	1.946	-0.054	0.011	1.378	3.976		
14	4	1.946	3.000	-0.054	2.779	1.966	-0.014	0.001	0.360	1.021		
15	5	1.966	3.000	-0.014	2.779	1.971	-0.003	0.000	0.106	0.254		
16												
17	x=t	1.971	Raíz aproximada con E_a<0.5%									
18	f(x)	-0.003										
19	T(t)	77.497										

FIGURA 2.7. Aplicación de una hoja de cálculo para encontrar la raíz de la función $f(x) = 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$ por el método de falsa posición. La tabla se realizó con la hoja de cálculo Excel.

La Fig. 2.7 muestra un formato de la hoja de cálculo Excel para desarrollar el algoritmo de falsa posición. De acuerdo con la tabla de la Fig.2.7 se tiene que a 5 iteraciones $\epsilon_a\%$ está por debajo de $\epsilon_s = 0.5\%$. Conforme a los resultados se tiene que aproximadamente en la última semana del mes de enero $t = 1.971$ con una incertidumbre de 0.083% así la temperatura alcanza un valor de $T = 77.5$ °F. Observe cómo el error decrece mucho más rápidamente en el método de la falsa posición que en el de bisección. En efecto, el método de falsa posición presenta un esquema más eficiente en cuanto a la localización de las raíces.

2.4 Métodos abiertos

Los métodos abiertos parten de uno o dos valores iniciales que no necesariamente encierran a la raíz para aproximar el valor de x tal que $f(x) = 0$. Al comparar, los métodos cerrados garantizan la convergencia cuando al evaluar $f(x)$ en el intervalo cambien de signo mientras que los métodos abiertos en algunos casos divergen alejándose de la raíz verdadera a medida que avanza el cálculo. No obstante, cuando los métodos abiertos convergen, lo hacen mucho más rápido que los métodos cerrados.

2.4.1 Método de Newton-Raphson

El método de Newton-Raphson consiste en aproximar la raíz de una función mediante el punto de corte de una recta con el eje x que pasa por el punto $(x_i, f(x_i))$ **tangente** de la curva definida por $f(x)$ tal como muestra en el gráfico del lado izquierdo de la Fig.2.8. El punto x_i es el valor inicial de la raíz y el punto de corte x_{i+1} es el valor aproximado a la raíz.

El gráfico del lado derecho de la Fig. 2.8. muestra que, al converger el método (mediante un proceso de iteración) se generan rectas tangentes cuyos puntos de corte con el eje x se aproximan hacia el valor real de la raíz. El algoritmo para determinar la raíz por el método de Newton-Raphson se describe a continuación:

1. Elegir un punto inicial x_i .

2. Proceso de iteración:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad \text{si } f'(x_i) \neq 0. \quad (2.5)$$

3. Error aproximado y criterio de paro:

$$\left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right| 100\% \leq \epsilon_s. \quad (2.6)$$

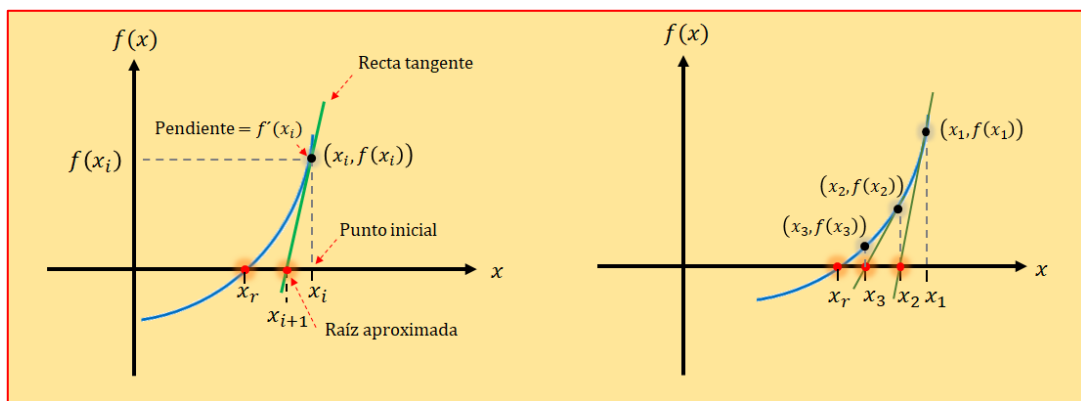


FIGURA 2.8. Aproximación de una raíz por el método de Newton-Raphson

La presencia de $f'(x_i)$ (derivada de la función $f(x)$ evaluada en el punto x_i) en la Ec.2.5 corresponde a la pendiente de la recta tangente que corta en el punto $(x_i, f(x_i))$.

Ejemplo 2.4

Temperatura en la ciudad de Miami

Realizar el ejemplo 2.2 empleando el método de Newton-Raphson.

Paso I: Hacer un bosquejo de la función empleando un graficador, aplicando cálculo o construyendo una tabla de datos. La gráfica se aprecia en la Fig. 2.2.

Paso II: Elegir un valor inicial $x_i = x_0 = 1.5$.

Paso III: Calcular $f'(x)$ empleando las reglas de derivación

$$f(x) = 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95) \Rightarrow f'(x) = 3.6644 \cos(0.4912x - 1.95)$$

Recuerde que la raíz real es 1.973

Paso IV: Proceso de iteración empleando el algoritmo de Newton-Raphson empezando con el valor inicial de $x_0 = 1.5$. Así pues, partiendo de $i = 0$

Función y derivada evaluada en $x_0 = 1.5$	Raíz aproximada
$f(x_0) = f(1.5) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(1.5) - 1.95]$ $= -0.788$ $f'(x_0) = f'(1.5) = 3.644 \cos[0.4912(1.5) - 1.95]$ $= 1.283$	$x_{0+1} = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$ $x_1 = 1.5 - \frac{(-0.788)}{1.283}$ $= 2.114$
Error relativo	Error aproximado
$E_{\%} = \left \frac{1.973 - 2.114}{1.973} \right 100\% = 7.193\%$	$\epsilon_a = \left \frac{2.114 - 1.5}{2.114} \right 100\% = 29.059\%$

Seguidamente para $i = 1, x_1 = 2.114$

Función y derivada evaluada en $x_1 = 2.114$	Raíz aproximada
$f(x_1) = f(2.114) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(2.114) - 1.95]$ $= 0.304$ $f'(x_1) = f'(2.114) = 3.644 \cos[0.4912(2.114) - 1.95]$ $= 2.245$	$x_{1+1} = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$ $x_2 = 2.114 - \frac{0.304}{2.245}$ $= 1.979$
Error relativo %	Error aproximado %

$$E_{\%} = \left| \frac{1.973 - 1.979}{1.973} \right| 100\% = 0.329\%$$

$$\epsilon_a = \left| \frac{1.979 - 2.114}{1.979} \right| 100\% = 6.841\%$$

En resumen, se tiene que siguiendo el algoritmo los resultados corresponden a los presentando en la tabla de la siguiente imagen

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1									
2		Raíz de la función					Algoritmo de Newton - Raphson		
3		$f(x) = 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$					$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$		
4		$f'(x) = 7.46 (0.4912) \cos(0.4912t - 1.95)$					$i = 0, 1, 2, \dots, n$		
5									
6		Valores inicial		Valor verdadero					
7		x_i	1.5	x_v	1.973				
8									
9		Procedimiento numérico del método de Newton - Raphson							
10		i	x_i	f(x_i)	f'(x_i)	f(x_i)/f'(x_i)	E_%	E_a%	
11		0	1.500	-0.788	1.283	-0.614	23.956		
12		1	2.114	0.304	2.245	0.135	7.193	29.059	
13		2	1.979	0.013	2.048	0.006	0.329	6.841	
14		3	1.973	0.000	2.038	0.000	0.001	0.328	
15									
16		x=t	1.973	Raíz aproximada con E_a<0.5%					
17		f(x)	0.000						
18		T(t)	77.500						
19									

FIGURA 2.9. Aplicación de una hoja de cálculo para encontrar la raíz de la función $f(x) = 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$ por el método de Newton-Raphson. La tabla se realizó con la hoja de cálculo Excel.

La Fig. 2.9 muestra un formato de la hoja de cálculo Excel para desarrollar el algoritmo de Newton-Raphson. De acuerdo con la tabla de la Fig.2.9 se tiene que a 3 iteraciones ϵ_a está por debajo de $\epsilon_s = 0.5\%$. Conforme a los resultados se observa que aproximadamente en la última semana del mes de enero $t = 1.973$ con una incertidumbre de 0.001% así la temperatura alcanza un valor de $T = 77.5^\circ\text{F}$. Puede apreciarse que el método de Newton-Raphson es de convergencia rápida comparado con los métodos cerrados.

2.4.2 Método de la Secante

El método de la secante consiste en aproximar la raíz de una función extrapolando una recta secante que corta al eje x y pasa por los $(x_i, f(x_i))$ y $(x_{i-1}, f(x_{i-1}))$ tal y como se muestra en el gráfico del lado izquierdo de la Fig.2.10. El método requiere de dos valores iniciales x_{i-1} y x_i (que no necesariamente acoten a la raíz). Sin embargo, no se necesita que $f(x)$ cambie de signo entre los valores dados. El corte de la secante x_{i+1} con el eje x proporciona la raíz aproximada.

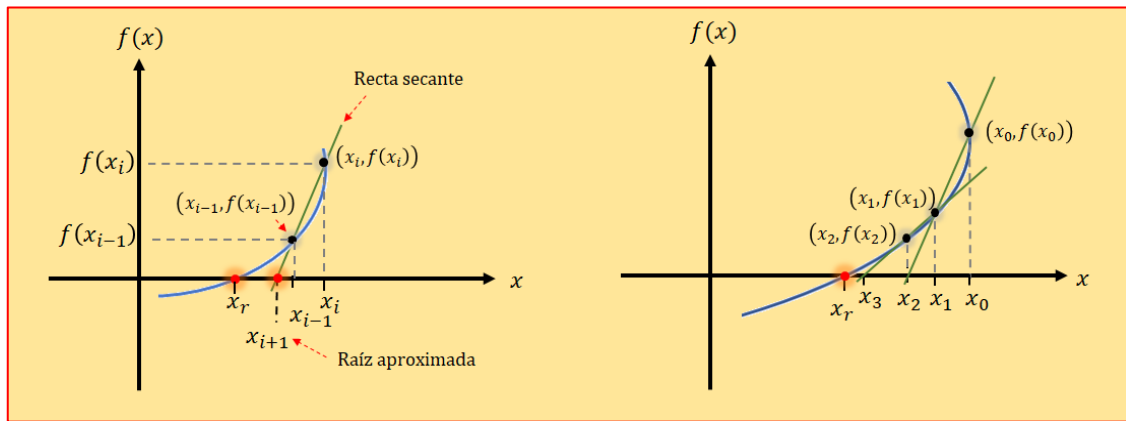


Figura 2.10. Aproximación de la raíz por el método de la Secante.

En el gráfico del lado derecho de la Fig. 2.10 se muestra que al converger el método (mediante un proceso de iteración) se generan rectas secantes cuyos puntos de corte con el eje x se aproximan hacia el valor real de la raíz. El algoritmo para determinar la raíz por el método de la secante se describe a continuación:

1. Elegir dos puntos iniciales x_{i-1} y x_i .
2. Proceso de iteración:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_{i-1} - x_i)}{f(x_{i-1}) - f(x_i)}. \quad (2.7)$$

3. Error aproximado y criterio de paro (dado en la Ec. (2.6)):

$$\left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right| 100\% \leq \epsilon_s.$$

Ejemplo 2.5

Temperatura en la ciudad de Miami

Realizar el ejemplo 2.2 empleando el método de la secante

Paso I: Hacer un bosquejo de la función empleando un graficador, aplicando cálculo o construyendo una tabla de datos. La gráfica se aprecia en la Fig. 2.2.

Paso II: Elegir dos valores iniciales $x_{-1} = 3$ y $x_0 = 4$

Paso III: Proceso de iteración empleando el algoritmo de la secante. Recuerde que la raíz real es 1.973.

Primera iteración. Tomando los valores iniciales $x_{-1} = 4$ y $x_0 = 3$.

Función evaluada en $x_{-1} = 3$ y $x_0 = 4$	Raíz aproximada
$f(x_{-1}) = f(4) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(4) - 1.95]$ $= 6.310$	$x_{0+1} = x_0 - \frac{f(x_0)(x_{-1} - x_0)}{f(x_{-1}) - f(x_0)}$
$f(x_0) = f(3) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(3) - 1.95]$ $= 2.779$	$x_1 = 3 - \frac{2.779(4 - 3)}{6.310 - 2.779}$ $= 2.213$
Error relativo	

$$E_{\%} = \left| \frac{1.973 - 2.213}{1.973} \right| 100\% = 12.193\%$$

Segunda iteración $x_0 = 3$ y $x_1 = 2.213$

Función evaluada en $x_0 = 3$ y $x_1 = 2.213$	Raíz aproximada
$f(x_0) = f(3) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(3) - 1.95]$ $= 2.779$ $f(x_1) = f(2.213) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(2.213) - 1.95]$ $= 0.532$	$x_{1+1} = x_1 - \frac{f(x_1)(x_0 - x_1)}{f(x_0) - f(x_1)}$ $x_2 = 2.213 - \frac{0.532 (3 - 2.113)}{2.279 - 0.532}$ $= 2.027$
Error relativo %	Error aproximado %
$E_{\%} = \left \frac{1.973 - 2.027}{1.973} \right 100\% = 2.743\%$	$\epsilon_a = \left \frac{2.027 - 2.213}{2.027} \right 100\%$ $= 9.198\%$
Tercera iteración $x_1 = 2.213$ y $x_2 = 2.027$	
Función evaluada en $x_1 = 2.213$ y $x_2 = 2.027$	Raíz aproximada
$f(x_1) = f(2.213) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(2.213) - 1.95]$ $= 0.532$ $f(x_2) = f(2.027) = 6.2 + 7.46 \sin[0.4912(2.027) - 1.95]$ $= 0.112$	$x_{2+1} = x_2 - \frac{f(x_2)(x_1 - x_2)}{f(x_1) - f(x_2)}$ $x_3 = 2.027$ $- \frac{0.112 (2.113 - 2.027)}{0.532 - 0.112}$ $x_3 = 1.977$
Error relativo %	Error aproximado %
$E_{\%} = \left \frac{1.973 - 1.977}{1.973} \right 100\% = 0.212\%$	$\epsilon_a = \left \frac{1.977 - 2.027}{1.977} \right 100\%$ $= 2.526\%$
<p>Al seguir el algoritmo se obtienen los resultados que se muestran en la tabla de la Fig.2.11 donde se aplica una hoja de cálculo Excel para desarrollar el método de la secante. Nótese que a 4 iteraciones ϵ_a está por debajo de $\epsilon_s = 0.5\%$. En efecto, los resultados muestran que aproximadamente en la última semana del mes de enero $t = 1.977$ con una incertidumbre de 0.004% así la temperatura alcanza un valor de $T = 77.5^\circ\text{F}$.</p>	

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	
1											
2					Raíz de la función			Algoritmo de la secante			
3					$f(x) = 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$			$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_{i-1} - x_i)}{f(x_{i-1}) - f(x_i)}$			
4								$i = 0, 1, 2, \dots, n$			
5					Valor verdadero		1.973				
6					Valores iniciales						
7	x_i-1		3		x_i		4				
8											
9	Procedimiento numérico del método de la secante										
10	i	x_i-1	x_i	f(x_i-1)	f(x_i)	x_i+1	E_%	E_a%			
11	0	4.000	3.000	6.310	2.779	2.213	12.193				
12	1	3.000	2.213	2.779	0.532	2.027	2.743	9.198			
13	2	2.213	2.027	0.532	0.112	1.977	0.212	2.526			
14	3	2.027	1.977	0.112	0.009	1.973	0.004	0.208			
15											
16	x=t	1.977	Raíz aproximada con E_a<0.5%								
17	f(x)	0.009									
18	T(t)	77.509									

FIGURA 2.11. Aplicación de una hoja de cálculo para encontrar la raíz de la función $f(x) = 6.2 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$ por el método de la secante. La tabla se realizó con la hoja de cálculo Excel

Al comparar los métodos abiertos y cerrados se tiene que los primeros son de convergencia rápida.

2.5 Puntos óptimos

El punto óptimo es aquel donde la curva es plana. En el lenguaje del cálculo corresponde al valor de x tal que la derivada de $f(x)$ sea igual a cero, es decir **la pendiente de la recta tangente a la curva es nula** como se muestra en la Fig. 2.12. La localización de puntos óptimos y de raíces están relacionadas en el sentido de que ambas involucran valores iniciales y la búsqueda de un punto en una función.

2.6 Valores máximos y mínimos

Los valores máximos y mínimos son aquellos donde la función $f(x)$ es óptima, la diferencia es que en los puntos máximos corresponde a valores de x tal que la segunda derivada $f''(x) < 0$ y en los puntos mínimos los valores de x tal que

$f''(x) > 0$. La optimización en una sola variable tiene como objetivo encontrar el valor de x que da un extremo, ya sea un máximo o un mínimo de $f(x)$ tal como se muestra en el gráfico del lado izquierdo de la Fig. 2.13. Existen dos tipos de valores óptimos los cuales corresponden a los óptimos globales y a los óptimos locales (ver gráfico del lado derecho de la Fig. 2.13).

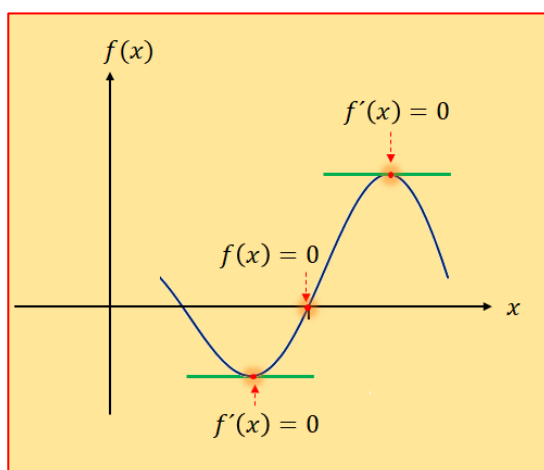


FIGURA 2.12. Puntos óptimos y raíz de una función.

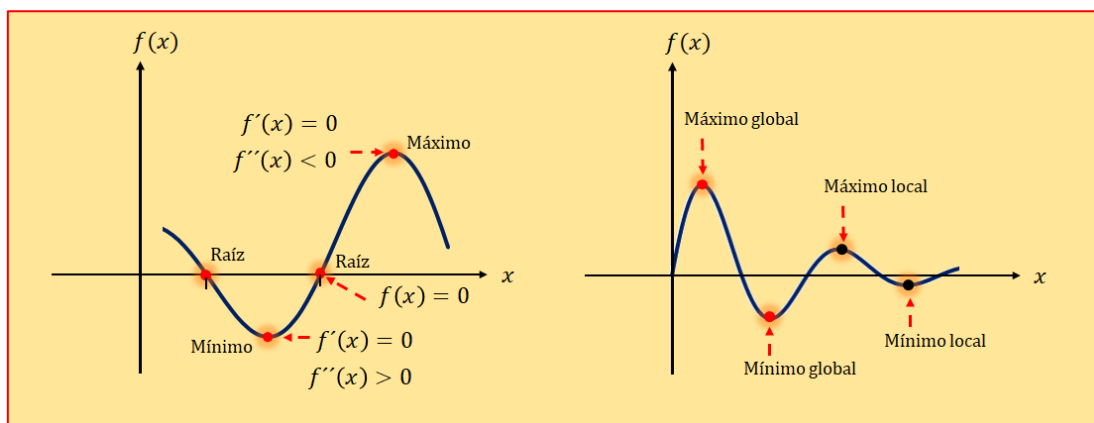


FIGURA 2.13. Raíces y puntos óptimos.

Así como en la localización de las raíces, los problemas de optimización unidimensional se pueden dividir en métodos cerrados y métodos abiertos. No obstante, algunos métodos de optimización tratan de encontrar un punto óptimo

resolviendo el problema de hallar la raíz: $f'(x) = g(x) = 0$ tal y como se aprecia en el siguiente ejemplo.

Ejemplo 2.6**Temperatura máxima en la ciudad de Miami**

Del ejemplo 2.1, en la ciudad de Miami la temperatura (en grados Fahrenheit) anual viene dada por el siguiente modelo:

$$T(t) = 83.70 + 7.46 \sin(0.4912t - 1.95) \quad \text{con } 1 \leq t \leq 12$$

con $t = 1$ correspondiente al mes de enero (Larson y Edwards, 2010). A partir de la raíz de $f'(x) = g(x) = 0$ con el método de Newton–Raphson con un criterio de paro de $\epsilon_s = 0.5\%$, calcule la temperatura máxima alcanzada e indique en que mes y semana se presenta.

Sugerencia: Tome en cuenta que para t la parte entera representa el mes y la parte decimal la semana.

Paso I: Problema matemático. Dado:

$$T(t) = 83.70 + 7.46 \sin(0.4912t - 1.95) .$$

haciendo $T = f$ y $x = t$ se tiene que f y su primera derivada vienen dada por:

$$f(x) = 83.70 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95) \Rightarrow f'(x) = g(x) = 3.6644 \cos(0.4912x - 1.95)$$

El problema se resume a encontrar el valor de x tal que $g(x) = 0$ para luego evaluar ese valor en la función $f(x)$.

Paso II: Hacer la gráfica construyendo una tabla de datos y empleando un graficador. La Fig.2.14 muestra que la localización de la raíz de $g(x)$ corresponde al valor de x que optimiza (maximiza) la función $f(x)$. Ahora bien, con el objetivo de cuantificar el error

verdadero en la aproximación se tiene que al emplear métodos algebraicos en la siguiente ecuación

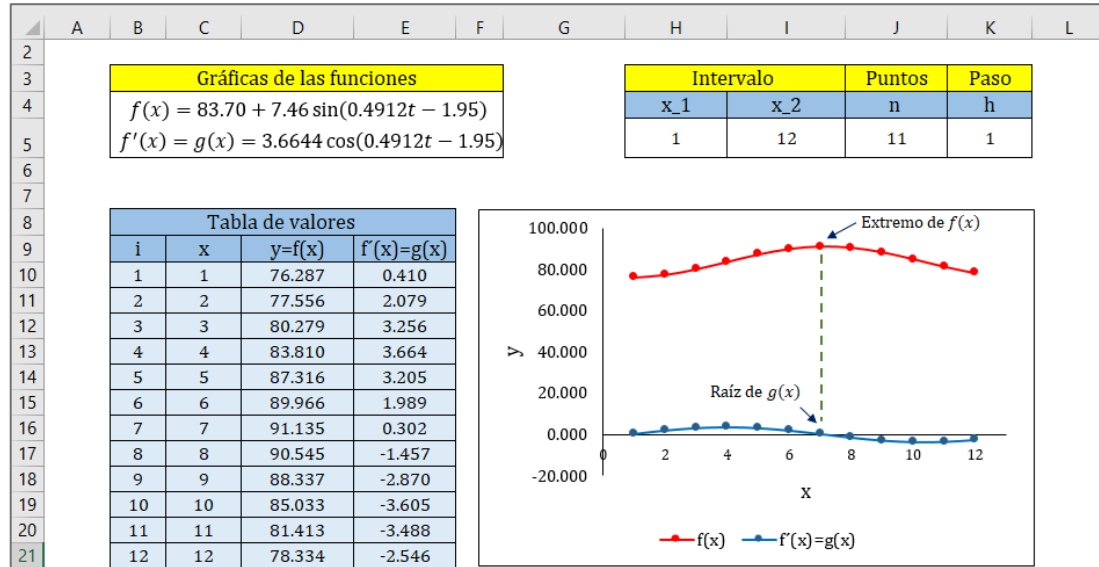


FIGURA 2.14. Gráfica de la función $f(x) = 83.70 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$ y $g(x) = 3.6644 \cos(0.4912x - 1.95)$. Las gráficas se realizaron con la hoja de cálculo Excel.

$$3.6644 \cos(0.4912x - 1.95) = 0$$

resolviendo para x se desprende:

$$x = \frac{1}{0.4912} \left(\frac{\pi}{2} + 1.95 \right) = 7.168.$$

El problema tiene solución exacta al igual que el ejemplo 2.1. El propósito es mostrar la exactitud y precisión del método numérico presentado al compararlo con el valor obtenidos anteriormente. Sin embargo, como se ha venido mencionando obtener (en algunos problemas) un resultado exacto no es trivial o simplemente no tiene.

Paso III: Emplear el algoritmo de Newton-Raphson con $x_0 = 6$. Al seguir el algoritmo de manera similar que el ejemplo 2.4. se obtienen resultados que son mostrados en la tabla de la Fig.2.15 donde se ha empleado una hoja de cálculo Excel. Se observa que a 3 iteraciones ϵ_a está por debajo de $\epsilon_s = 0.5\%$. El valor que optimiza a la función $f(x)$ es

$x = 7.168$ y al evaluar en la función resulta que $f(7.168) = 91.160$. Por consiguiente, se concluye que al evaluar $t = 7.168$ en la ecuación

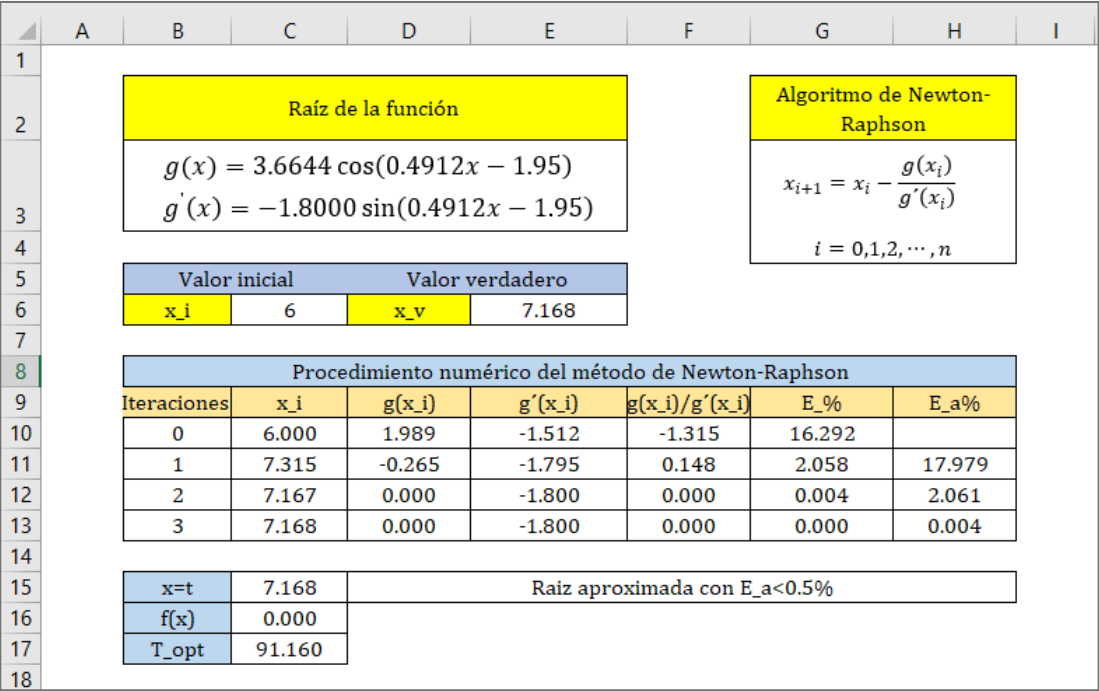


FIGURA 2.15. Aplicación de una hoja de cálculo para encontrar la raíz de la función $g(x) = 3.6644 \cos(0.4912x - 1.95)$ por el método de Newton-Raphson. La tabla se realizó con la hoja de cálculo Excel.

$$T(7.168) = 83.70 + 7.46 \sin[0.4912(7.168) - 1.95] = 91.160^{\circ}\text{F}$$

la temperatura alcanza su valor máximo de $T(7.168) = 91.160^{\circ}\text{F}$. El valor de $t = 7.168$ con una incertidumbre de $\sim 10^{-11}\%$ (no ilustrado en la tabla dado que se han reflejado sólo 4 cifras significativas) corresponde a la primera semana del mes de julio. La desventaja de aplicar este método radica en que las derivadas en algunos casos se complican o no se pueden obtener analíticamente.

2.6.1 Búsqueda de la sección dorada

El método de búsqueda de la sección dorada es un método cerrado que se basa en tres puntos iniciales: dos considerados los extremos de un intervalo x_i y x_s y el

tercero x_1 entre los dos primeros, de tal forma que se satisfaga la siguiente relación entre las distancias:

$$\frac{x_s - x_1}{x_s - x_i} = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} = \varphi = 0.618034 \dots \quad (2.8)$$

El valor óptimo de x aproximado se genera en un cuarto punto x_2 localizado entre los puntos x_1 y x_s tal y como se muestra en la Fig. 2.16. Al igual que en la Ec. 2.8 se satisface la siguiente relación entre las distancias:

$$\frac{x_2 - x_1}{x_2 - x_i} = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} = \varphi = 0.618034 \dots \quad (2.9)$$

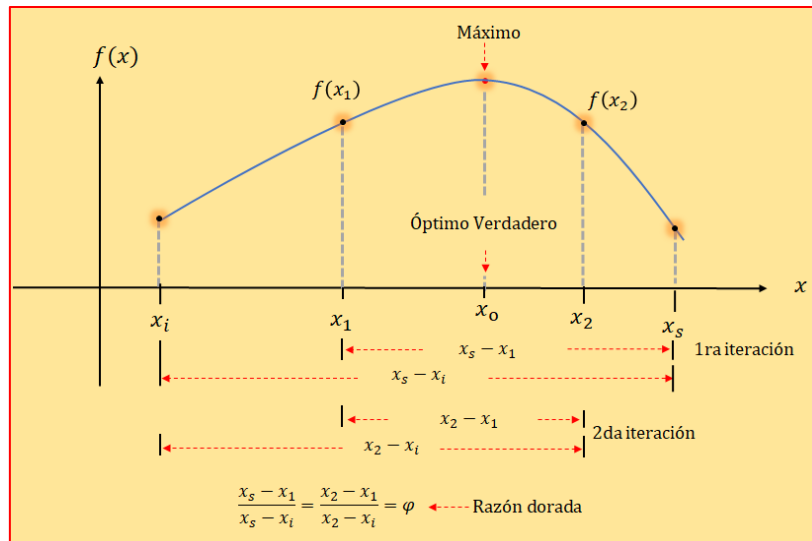


FIGURA 2.16. Método de búsqueda de la sección dorada.

El número φ presentado en las Ec. 2.8 y Ec 2.9 es conocido en la literatura como **“Razón dorada” o Aurea**, llamado así por los antiguos griegos y de aquí el nombre del método (Chapra y Canale, 2007). El número φ (al igual que el número π) es un número irracional especial en matemáticas y que aparece en diversos fenómenos de ciencias e ingeniería.

El algoritmo para determinar el valor de x que da un extremo, ya sea un máximo o un mínimo de $f(x)$ viene dado por:

1. Elegir los puntos que definen el intervalo x_i y x_s .
2. Calcular los puntos interiores:

$$\begin{aligned} x_1 &= x_i + d, \\ x_2 &= x_s - d. \end{aligned} \quad \text{con } d = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} (x_s - x_i). \quad (2.10)$$

3. Evaluar $f(x_1)$ y $f(x_2)$ donde:

$$\begin{aligned} x_{\text{ópt}} &= x_1 \\ x_i &= x_2 \end{aligned} \quad \text{si } f(x_1) > f(x_2). \quad (2.11)$$

El intervalo de x_i a x_2 se elimina de la búsqueda ya que no contiene al máximo

$$\begin{aligned} x_{\text{ópt}} &= x_2 \\ x_s &= x_1 \end{aligned} \quad \text{si } f(x_1) < f(x_2) \quad (2.12)$$

El intervalo de x_1 a x_s se elimina de la búsqueda ya que no contiene al máximo

4. El error aproximado y el criterio de paro quedan como:

$$\epsilon_a = \left[1 - \left(\frac{\sqrt{5} - 1}{2} \right) \right] \left| \frac{x_s - x_i}{x_{\text{ópt}}} \right| 100\% \quad (2.13)$$

Ejemplo 2.7

Temperatura máxima en la ciudad de Miami

Realizar el ejemplo 2.6 empleando el método de búsqueda de la sección dorada.

Paso I: Hacer un bosquejo de la función empleando un graficador, aplicando cálculo o construyendo una tabla de datos. La gráfica se aprecia en la Fig. 2.14.

Paso II: Elegir los puntos que definen el intervalo. Acorde al gráfico de la Fig. 2.14 dos candidatos son $x_i = 6$ y $x_s = 8$.

Paso III: Proceso de iteración empleando el algoritmo de búsqueda de la sección dorada. Recuerde que el valor real de x que optimiza $f(x)$ es 7.168.

Primera iteración $i = 1, x_i = 6$ y $x_s = 8$.

Puntos interiores x_1, x_2 y d	Función evaluada en x_1 y x_2
$d = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} (x_s - x_i)$ $= \frac{\sqrt{5} - 1}{2} (8 - 6)$ $= 1.236$ $x_1 = x_i + d = 6 + 1.236$ $= 7.236$ $x_2 = x_s - d = 8 - 1.236$ $= 6.674$	$f(x_1) = f(7.236) = 83.7 + 7.46 \sin[0.4912(7.236) - 1.95]$ $= 91.156$ $f(x_2) = f(6.674) = 83.7 + 7.46 \sin[0.4912(6.674) - 1.95]$ $= 91.014$
Condicional	$f(x_1) > f(x_2)$
Valor de x óptimo y $E\%$	Error aproximado
$x_{\text{ópm}} = x_1 = 7.236$ $E\% = \left \frac{7.168 - 7.236}{7.168} \right 100\%$ $= 0.953\%$	$\epsilon_a = \left[1 - \left(\frac{\sqrt{5} - 1}{2} \right) \right] \left \frac{x_s - x_i}{x_{\text{ópt}}} \right 100\%$ $= \left[1 - \left(\frac{\sqrt{5} - 1}{2} \right) \right] \left \frac{8 - 6}{7.236} \right 100\%$ $= 10.557\%$

Segunda iteración $i = 2, x_i = x_2 = 6.674$ y $x_s = 8$

Puntos interiores x_1, x_2 y d	Función evaluada en x_1 y x_2
$d = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} (8 - 6.674)$ $= 0.764$	$f(x_1) = f(7.528) = 83.7 + 7.46 \sin[0.4912(7.528) - 1.95]$ $= 91.044$

$x_1 = 6.674 + 0.764$ $= 7.528$ $x_2 = 8 - 0.764$ $= 7.236$	$f(x_2) = f(7.236) = 83.7 + 7.46 \sin[0.4912(7.236) - 1.95]$ $= 91.156$
Condicional	$f(x_1) < f(x_2)$
Valor de x óptimo	Error aproximado
$x_{\text{óptm}} = x_2 = 7.236$ $E\% = \left \frac{7.168 - 7.236}{7.168} \right 100\%$ $= 0.953\%$	$\epsilon_a = \left[1 - \left(\frac{\sqrt{5} - 1}{2} \right) \right] \left \frac{8 - 6.674}{7.236} \right 100\%$ $= 6.525\%$

Los valores de $x_{\text{ópt}}$ se repiten. No obstante, al efectuar el proceso de iteración se obtienen los resultados que se muestran en la tabla de la Fig.2.17 donde se aplica una hoja de cálculo Excel para desarrollar el algoritmo de la búsqueda de la sección dorada.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
2		Extremo de la función					Algoritmo de la sección dorada						
3		$f(x) = 83.7 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$					$x_1 = x_i + d, \quad x_2 = x_s - d, \quad \text{con } d = \frac{\sqrt{5}-1}{2} (x_s - x_i); \quad \epsilon_a = \left[1 - \left(\frac{\sqrt{5}-1}{2} \right) \right] \left \frac{x_s - x_i}{x_{\text{ópt}}} \right 100\%$ $x_{\text{ópt}} = x_1 \quad \text{si } f(x_1) > f(x_2) \quad \text{o} \quad x_{\text{ópt}} = x_2 \quad \text{si } f(x_1) < f(x_2)$						
4													
5		Valor verdadero			7.168								
6		Valores iniciales											
7		x_i	6	x_s	8.000								
8													
9		Procedimiento numérico del método de la sección dorada											
10		i	x_i	x_s	d	x_1	x_2	f(x_1)	f(x_2)	x_opt	E_%	E_a%	
11		1	6.000	8.000	1.236	7.236	6.764	91.156	91.014	7.236	0.953	10.557	
12		2	6.764	8.000	0.764	7.528	7.236	91.044	91.156	7.236	0.953	6.525	
13		3	6.764	7.528	0.472	7.236	7.056	91.156	91.149	7.236	0.953	4.033	
14		4	7.056	7.528	0.292	7.348	7.236	91.131	91.156	7.236	0.953	2.492	
15		5	7.056	7.348	0.180	7.236	7.167	91.156	91.160	7.167	0.008	1.555	
16		6	7.056	7.236	0.111	7.167	7.125	91.160	91.158	7.167	0.008	0.961	
17		7	7.125	7.236	0.069	7.193	7.167	91.159	91.160	7.167	0.008	0.594	
18		8	7.125	7.193	0.043	7.167	7.151	91.160	91.160	7.167	0.008	0.367	
19													
20		x=t	7.167	Extremo aproximado con E_a<0.5%									
21		T_opt	91.160										

FIGURA 2.17. Aplicación de una hoja de cálculo para encontrar el extremo de la función $f(x) = 83.7 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$ por el método de la búsqueda de la sección dorada. La tabla se realizó con la hoja de cálculo Excel.

Así pues, a 8 iteraciones ϵ_a está por debajo de $\epsilon_s = 0.5\%$. El valor que optimiza a la función $f(x)$ es $x = 7.167$ y al evaluar en la función resulta $f(7.167) = 91.160$. Por consiguiente, se concluye que al evaluar $t = 7.167$ en la siguiente expresión se obtiene

$$T(7.167) = 83.70 + 7.46 \sin[0.4912(7.167) - 1.95] = 91.160^\circ\text{F}.$$

El resultado muestra que la temperatura alcanza su valor máximo de $T(7.167) = 91.160^\circ\text{F}$. El valor de $t = 7.168$ con una incertidumbre de 0.008 % que corresponde a la primera semana del mes de julio.

2.6.2 Método de Newton

En la localización de puntos óptimos se puede utilizar el método de Newton el cual es un método abierto que requiere de un valor inicial x_0 . Este es producto de definir una nueva función $g(x) = f'(x)$ tal que al evaluar en el punto $x_{\text{ópt}}$ se cumpla la siguiente igualdad, $g(x_{\text{ópt}}) = f'(x_{\text{ópt}}) = 0$. Para obtener el valor de $x_{\text{ópt}}$ se emplean los siguientes pasos:

1. Elegir un punto inicial x_i .

2. Proceso de iteración:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f'(x_i)}{f''(x_i)} \quad \text{si } f''(x_i) \neq 0. \quad (2.14)$$

3. Error aproximado y criterio de paro:

$$\left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right| 100\% \leq \epsilon_s.$$

Cuando el método converge lo hace forma rápida, aunque en algunos casos diverge lo cual representa una desventaja, es por ello que se recomienda verificar que la segunda derivada $f''(x_i)$ tenga el signo correcto. Además, las derivadas pueden complicarse o simplemente no se pueden obtener analíticamente.

Ejemplo 2.8

Temperatura máxima en la ciudad de Miami

Realizar el ejemplo 2.6 empleando el método de Newton

Paso I: Hacer un bosquejo de la función empleando un graficador, aplicando cálculo o construyendo una tabla de datos. La gráfica se aprecia en la Fig. 2.14.

Paso II: Elegir valor inicial de la raíz $x_i = x_1 = 8$

Paso III: Calcular $f'(x)$ y $f''(x)$ empleando las reglas de derivación

$$f(x) = 83.70 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95) \Rightarrow \begin{aligned} f'(x) &= 3.6644 \cos(0.4912x - 1.95) \\ f''(x) &= -1.7999 \sin(0.4912x - 1.95) \end{aligned}$$

Paso IV: Proceso de iteración. Comience con el valor inicial de $x_0 = 8$. Así pues, partiendo de $i = 0$ se tiene

$f'(x)$ y $f''(x)$ evaluada en $x_0 = 8$	$x_{\text{ópt}}$ aproximado
$\begin{aligned} f'(x_0) &= f'(8) = 3.644 \cos[0.4912(8) - 1.95] \\ &= -1.457 \\ f''(x_0) &= f''(8) = -1.7999 \sin[0.4912(8) - 1.95] \\ &= -1.652 \end{aligned}$	$\begin{aligned} x_{0+1} &= x_0 - \frac{f'(x_0)}{f''(x_0)} \\ x_1 &= 8 - \frac{(-1.457)}{(-1.652)} \\ &= 7.118 \end{aligned}$
Error verdadero %	Error aproximado %
$\begin{aligned} E_{\%} &= \left \frac{7.168 - 7.118}{7.168} \right 100\% \\ &= 0.693\% \end{aligned}$	$\begin{aligned} \epsilon_a &= \left \frac{7.118 - 8}{7.118} \right 100\% \\ &= 12.390\% \end{aligned}$
Seguidamente para $i = 1, x_1 = 7.118$	
$f'(x)$ y $f''(x)$ evaluada en $x_1 = 7.118$	$x_{\text{ópt}}$ aproximado

$f'(x_1) = f'(7.118) = 3.644 \cos[0.4912(7.118) - 1.95]$ $= 0.889$ $f''(x_1) = f''(7.118) = -1.7999 \sin[0.4912(7.118) - 1.95]$ $= -1.799$ Error verdadero %	$x_{1+1} = x_1 - \frac{f'(x_1)}{f''(x_1)}$ $x_2 = 7.118 - \frac{0.889}{(-1.799)}$ $= 7.1678$ Error aproximado %
$E_{\%} = \left \frac{7.168 - 7.1678}{7.168} \right 100\%$ $= 0.0001\%$	$\epsilon_a = \left \frac{7.1678 - 7.118}{7.1678} \right 100\%$ $= 0.693\%$

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1									
2		Extremo de la función					Algoritmo de Newton		
		$f(x) = 83.70 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$ $f'(x) = 3.6644 \cos(0.4912x - 1.95)$ $f''(x) = -1.8000 \sin(0.4912x - 1.95)$					$x_{i+1} = x_i - \frac{f'(x_i)}{f''(x_i)}$ $i = 0, 1, 2, \dots, n$		
3									
4									
5		Valor inicial		Valor verdadero					
6		x_i	8	x_v	7.168				
7									
8		Procedimiento numérico del método de Newton							
9		Iteraciones	x_i	f'(x_i)	f''(x_i)	f'(x_i)/f''(x_i)	E_%	E_a%	
10		0	8.000	-1.457	-1.652	0.882	11.611		
11		1	7.118	0.089	-1.799	-0.050	0.693	12.390	
12		2	7.168	0.000	-1.800	0.000	0.000	0.693	
13		3	7.168	0.000	-1.800	0.000	0.000	0.000	
14									
15		x=t	7.168	Raiz aproximada con E_a<0.5%					
16		f(x)	0.000						
17		T_opt	91.160						

FIGURA 2.18. Aplicación de una hoja de cálculo para encontrar el extremo de la función $f(x) = 83.7 + 7.46 \sin(0.4912x - 1.95)$ por el método de Newton. La tabla se realizó con la hoja de cálculo Excel.

El proceso se repite, obteniéndose los resultados que se muestran en la tabla de la Fig.2.18 donde se aplica una hoja de cálculo Excel para desarrollar el algoritmo de Newton. De los resultados se aprecia que a 3 iteraciones ϵ_a está por debajo de $\epsilon_s = 0.5\%$. El valor que optimiza a la función $f(x)$ es $x = 7.168$ y al evaluar en la función

resulta $f(7.168) = 91.160$. Por consiguiente, se concluye que al evaluar $t = 7.168$ en la función se obtiene

$$T(7.168) = 83.70 + 7.46 \sin[0.4912(7.168) - 1.95] = 91.160^\circ\text{F}$$

El resultado muestra que la temperatura alcanza su valor máximo de $T(7.168) = 91.16^\circ\text{F}$. El valor de $t = 7.168$ con una incertidumbre de $\sim 10^{-14}\%$ (no ilustrado en la tabla dado que se han reflejado sólo 4 cifras significativas) corresponde a la primera semana del mes de julio. Nótese que el método es de alta convergencia y de algoritmo amigable. Sin embargo, al aplicarlo pueden presentarse funciones de derivadas no triviales o simplemente no se obtiene analíticamente.

2.7 Ejercicio de aplicación: Cálculo de niveles de oxígeno

En esta sección se procederá a realizar un estudio de caso para localizar raíces y puntos óptimos en un problema de ingeniería ambiental empleando una hoja de cálculo Excel.

Ejemplo 2.9

Niveles de oxígeno en un río

En la ingeniería ambiental, la siguiente ecuación se emplea para calcular el nivel de oxígeno c (mg/L) en un río aguas abajo de la descarga de un drenaje:

$$c(x) = 10 - 20(e^{-0.15x} - e^{-0.5x})$$

donde x es la distancia aguas abajo en kilómetros.

- Empleando una hoja de cálculo Excel: Insertar el procedimiento numérico del método de bisección para determinar la distancia aguas abajo de la corriente a la cual el nivel de oxígeno cae hasta una lectura de 5 mg/L. (Recomendación: está dentro de 2 km de la descarga). Encuentre la respuesta con un $\epsilon_a < 1\%$. Obsérvese que los niveles de oxígeno por debajo de 5 mg/L por lo general son dañinos para ciertas especies de pesca deportiva como la trucha y el salmón.

Paso I: Problema matemático. Determinar el valor de x tal que $c = 5$ se reduce a encontrar la raíz de la función:

$$f(x) = 20(e^{-0.15x} - e^{-0.5x}) - 5$$

Paso II: Personalizar la hoja de cálculo para efectuar la gráfica de $c(x)$ y $f(x)$ tal y como se muestra en la Fig.19.

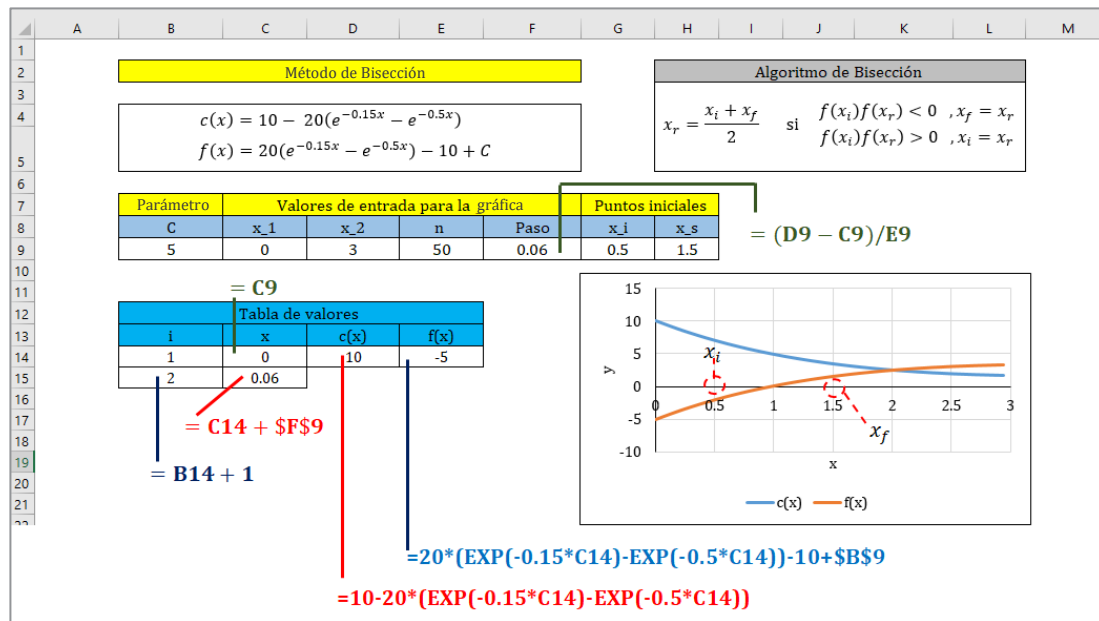


FIGURA 2.19. Gráfica de $c(x)$ y $f(x)$

Paso III: Insertar el algoritmo de bisección tal y como se muestra en la Fig. 2.20.

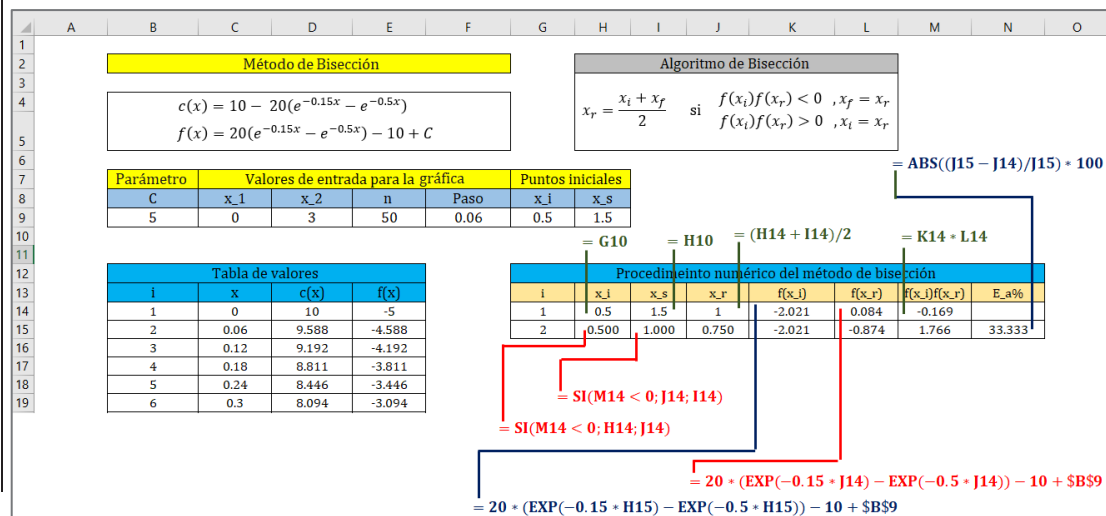


FIGURA 2.20. Algoritmo de bisección en una hoja de cálculo Excel.

Paso IV: Emplear la opción de arrastre de celda en Excel y terminar el cálculo. La Fig. 2.21 muestra que empleando el método de bisección en una hoja de cálculo Excel se obtiene que a 7 iteraciones el valor de x , con $\epsilon_s = 1\%$, tal que $c = 5$ corresponde a $x = 0.9766$ km con $\epsilon_a = 0.80\%$.

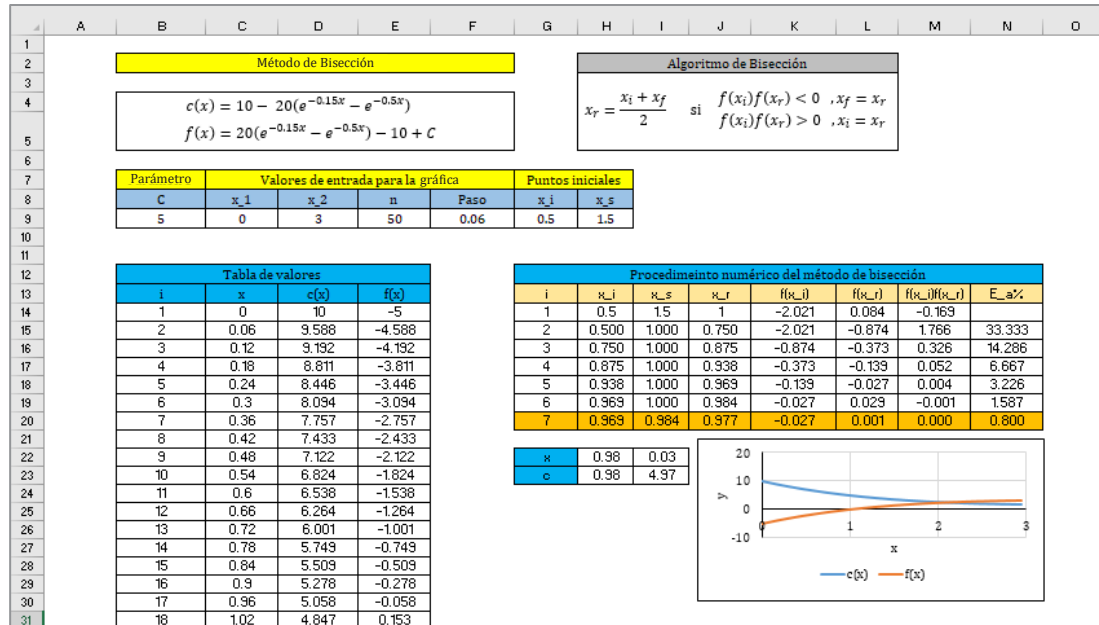


Figura 2.21. Cálculo numérico del método de bisección en Excel.

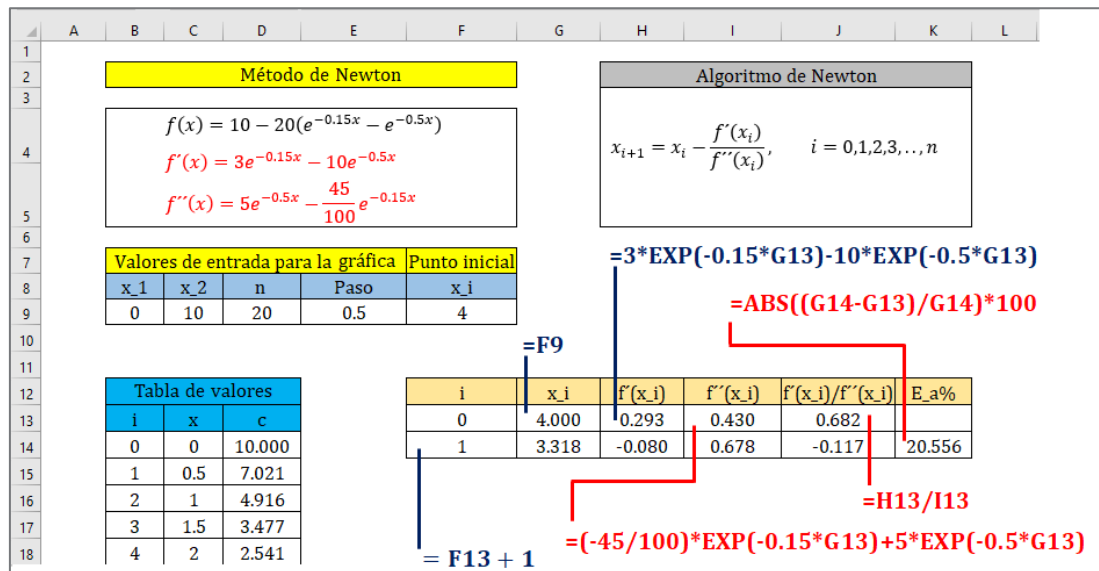


FIGURA 2.22. Algoritmo de Newton de optimización en Excel.

- b) Empleando una hoja de cálculo Excel insertar el procedimiento numérico del método de Newton para calcular la distancia agua abajo a la cual el oxígeno se encuentra al mínimo. Encuentre la respuesta con un $\epsilon_a < 1\%$. ¿Cuál es la concentración en dicha ubicación?

Paso I: Problema matemático determinar el valor de x tal que $c(x)$ sea mínimo. Haciendo $c = f$, las derivadas $f'(x)$ y $f''(x)$ corresponden a

$$f(x) = 10 - 20(e^{-0.15x} - e^{-0.5x}) \Rightarrow \begin{aligned} f'(x) &= 3e^{-0.15x} - 10e^{-0.5x} \\ f''(x) &= 5e^{-0.5x} - (45/100)e^{-0.15x} \end{aligned}$$

Paso II: Personalizar la hoja de cálculo para efectuar la gráfica de $f(x)$ e insertar el algoritmo de Newton. La inserción del gráfico se mostró en la Fig. 2.22

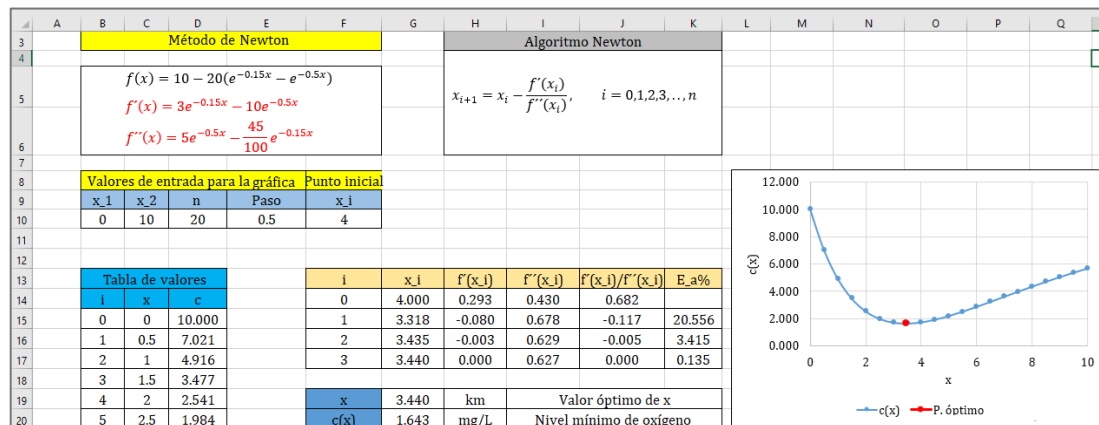


FIGURA 2.23. Cálculo numérico de Newton de optimización en Excel.

Paso III: Emplear la opción de arrastre de celda en Excel y terminar el cálculo. En la Fig. 2.23 se muestra que empleando el método de Newton en una hoja de cálculo Excel se obtiene que a 3 iteraciones el valor de x , con $\epsilon_a < 1\%$, que minimiza a $f(x)$ corresponde a $x_{\text{ópt}} = 3.4399$ km con $\epsilon_a = 0.1355\%$. La concentración mínima de oxígeno es $f(3.4399) = 1.6433$ mg/L.

2.8 Ejercicios propuestos

Observación:

- Resolver cada uno de los ejercicios planteados haciendo uso de la hoja de cálculo Excel.
- Diseñar cada gráfico con opciones que permitan ajustar el intervalo, el número de particiones y el incremento.
- Acorde al gráfico realizado tomar de forma arbitraria los valores iniciales si el planteamiento no los proporciona.

1.- Realizar el ejemplo 2.9, empleando: a) El procedimiento numérico de falsa posición para encontrar el valor de x tal que $c = 5$ mg/L, b) El procedimiento numérico de búsqueda la sección dorada para determinar el valor mínimo de x que minimiza la concentración y c) Los puntos encontrados para graficarlos junto con la curva de $y = c(x)$.

2.- Una central térmica quema carbón para generar energía eléctrica. El costo C , en dólares, de eliminar $p\%$ de las sustancias contaminantes del aire en sus emisiones de humo es:

$$C = \frac{80000p}{100 - p}, \quad 0 \leq p \leq 100.$$

- a) Utilizar el procedimiento numérico del método de bisección para determinar el porcentaje de material contaminante que se eliminaría con un costo de un millón de dólares. Encuentre la respuesta con un $\epsilon_a < 0.25\%$.



Central térmica de Laziska, ubicada en la ciudad polaca de Katowice. Once estados de la Unión Europea (UE) se niegan a usar carbón hasta el año 2030. En el año 2018 las plantas de la UE emitieron a la atmósfera 625 millones de toneladas de CO₂ equivalente al 2% de las emisiones a escala mundial. Fotografía: Monika Skolimowska (El País).

- b) Resolver el inciso anterior empleando el método de Newton-Raphson.
- c) Analizar los procedimientos numéricos de los incisos anteriores y comparar los resultados.

3.- La concentración de bacterias contaminantes c en un lago disminuye de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$c(t) = 75e^{-1.5t} + 20e^{-0.075t}$$

donde t tiene unidades de tiempo.

- Emplear el método gráfico para estimar el valor del tiempo que se requiere para que la concentración de bacterias se reduzca a 15.
- Resolver el inciso anterior empleando el procedimiento numérico del método de falsa posición con un criterio de detención de 0.05%.
- Resolver el inciso a) empleando el procedimiento numérico del método de la secante con un criterio de detención de 0.05%.
- Analizar los procedimientos numéricos de los incisos anteriores y comparar los resultados.

4.- El balance de masa de un contaminante en un lago bien mezclado se expresa como:

$$V \frac{dc}{dt} = W - Qc - kV\sqrt{c}.$$

Dados los parámetros $V = 1 \times 10^6 \text{ m}^3$, $Q = 1 \times 10^5 \text{ m}^3/\text{año}$ y $W = 1 \times 10^6 \text{ g/año}$ y $k = 0.25 \text{ m}^{0.5}/\text{año}$:

- Usar el procedimiento numérico del método de bisección para resolver la concentración en el estado estable con un criterio de detención de 0.01%.
- Utilizar el procedimiento numérico del método de la secante para resolver la concentración en el estado estable con un criterio de detención de 0.01%.
- Analizar los procedimientos numéricos de los incisos anteriores y comparar los resultados.

5.- Sea $x(t)$ el número de presas y $y(t)$ el número de depredadores que interactúan dentro de un mismo ambiente bajo un modelo de población fluctuante con período T

$$x(t) = 3e^{4 \sin(2\pi t/T)/3} ; y(t) = 2e^{2[1-\cos(2\pi t/T)]/3}.$$

donde t tiene unidades de tiempo. Dado el período $T = 1$ y el intervalo $[0, T]$:

- a) Emplear el procedimiento numérico de Newton-Raphson para encontrar el tiempo en que las poblaciones están equilibradas con un criterio de detención de 0.05%. A partir del resultado indicar el valor de la población de equilibrio.
- b) Utilizar el método de la sección dorada para encontrar el tiempo en que cada población alcanza su valor máximo con un criterio de detención de 0.05%. A partir del resultado indicar el valor máximo de la población de depredadores y presas.



Las diferentes especies que habitan un determinado ecosistema dependen unas de otras para sobrevivir (depredador-presa). Si se diese una situación de alteración entre dichas relaciones o incluso la desaparición de una o más de las especies que conforman el ecosistema, este sufriría grandes cambios en su estructura, perdiéndose así el equilibrio ecológico. Lamentablemente, prácticas como la caza indiscriminada de animales, la contaminación del agua, del aire y del suelo son factores que ponen en riesgo múltiples ecosistemas a nivel mundial. Fotografía: Vim Van Den Heever (La ciencia es Cultura).

- c) Resaltar las raíces y los puntos óptimos en el gráfico de $x(t)$ y $y(t)$.

6.-La radiactividad de una sustancia Y generada por la radiactividad de una sustancia X viene dada por la siguiente ecuación:

$$m_y = \frac{\lambda_x}{\lambda_y - \lambda_x} m_{0x} (e^{-\lambda_x t} - e^{-\lambda_y t})$$

donde $\lambda_x, \lambda_y =$ vida media en (s^{-1}) o inclusive ($años^{-1}$), de la sustancia X y Y , respectivamente y $m_{0x} =$ masa inicial de la sustancia X en (g). Dados $\lambda_x = 4.8$ y $\lambda_y = 0.6$:

- a) Utilizar el procedimiento numérico de Newton- Raphson para calcular el tiempo que le toma a la sustancia Y en alcanzar la mitad de la sustancia X . Encuentre la respuesta con un $\epsilon_a < 0.05\%$.

- b) Usar el algoritmo de Newton para calcular el tiempo que le toma a la sustancia Y en alcanzar su mayor radiactividad. Encuentre la respuesta con un $\epsilon_a < 0.05\%$.
- c) Resaltar los puntos encontrados en el gráfico $m_y = f(t)$.

7.- La cantidad A de CO_2 dentro de habitación con entrada y salida de corrientes de aire puede calcularse mediante la siguiente ecuación:

$$A = c_1[V_0 + (v_1 - v_2)t] + (A_0 - c_1V_0)[1 + (v_1 - v_2)t/V_0]^{v_2/(v_2-v_1)}$$

siendo el t el tiempo en (min) v_1, v_2 =la descarga del flujo de aire en (ft^3/min) de la corriente de entrada y salida, respectivamente, c_1 =La concentración C_{O_2} en el aire de la corriente entrante (contaminante) en (lb/ft^3), V_0 =volumen de aire inicial de la habitación justo antes de entrar el contaminante (ft^3) y A_0 = la cantidad inicial de CO_2 en la habitación justo antes de incidir la corriente de aire en (lb).

Ahora bien, supóngase que en una habitación de 12 por 8 por 8 pies tienen aire fresco sin CO_2 . A partir de $t = 0$ se introduce aire a la habitación con una concentración de CO_2 del 2% a razón de 50 ft^3/min . Si el aire de la habitación sale por una ventila con una razón de 60 ft^3/min ¿en qué momento (diferente de $t = 0$) la habitación se encontrará totalmente descontaminada de CO_2 ?. Hallar la respuesta aplicando el procedimiento numérico de bisección con un criterio de paro de $\epsilon_a < 0.25\%$.



El Dr. Andreu Veà, fundador de COVIDWarriors señala que diversos estudios científicos han comprobado que cuando el nivel de CO_2 en un espacio es muy elevado, se produce deterioro cognitivo: los alumnos aprenden menos, disminuyen su concentración, toman malas decisiones, son más torpes. Estar en aulas con concentraciones por encima de los 1000 ppm (0.6 lb/ft^3) de forma sostenida produce dolor de cabeza, y además favorece la transmisión de enfermedades como la gripe. Fotografía: Enric Fontcuberta (La Vanguardia).

8.-El modelo *Streeter-Phelps* se utiliza para calcular la concentración de oxígeno disuelto en un río aguas abajo del punto de descarga de un drenaje:

$$o = o_s - \frac{k_d L_0}{k_d + k_s - k_a} [e^{-k_a t} - e^{-(k_d + k_s)t}] - \frac{S_b}{k_a} (1 - e^{-k_a t})$$

donde o =concentración del oxígeno disuelto (mg/L), o_s =concentración de saturación de oxígeno disuelto (mg/L), t =tiempo de travesía (d), L_0 = concentración de la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) en el punto de mezcla (mg/L), k_d = razón de descomposición de DBO (d^{-1}), k_s = razón de asentamiento de DBO (d^{-1}), k_a = razón de oxigenación (d^{-1}), y S_b = demanda oxígeno de sedimentación (mg/L/d). Dados los valores

$$\begin{array}{lll} o_s = 10 \text{ mg/L} & k_d = 0.2d^{-1} & k_a = 0.8d^{-1} \\ k_s = 0.06d^{-1} & L_0 = 50 \text{ mg/L} & S_b = 1 \text{ mg/L/d} \end{array}$$

- Graficar el modelo *Streeter-Phelps* $o = f(t)$ con un paso $h = 0.5$ en el intervalo $[0.20]$.
- Usar cualquier procedimiento numérico para determinar el tiempo (abajo del punto de descarga) en el que el oxígeno alcanza su nivel mínimo crítico o_s . Este tiempo recibe el nombre de tiempo de travesía t_c . Hallar la respuesta con un $\epsilon_a < 0.5\%$.
- Encontrar a partir del tiempo de travesía t_c el nivel mínimo de oxígeno o_s . Resaltar el punto óptimo en el gráfico.



El punto crítico o_s se denomina “crítico” porque representa la ubicación en que la biota (flora y fauna) que depende del oxígeno (como los peces) estaría sujeta a la amenaza máxima. Fotografía: BioEnciclopedia.

9.- La concentración de saturación de oxígeno disuelto en agua dulce se calcula con la ecuación:

$$\ln o_{sf} = -139.34411 + 1.575701 \times 10^5 T_a^{-1} - 6.642308 \times 10^7 T_a^{-2} + 1.243800 \times 10^{10} T_a^{-3} - 8.621949 \times 10^{11} T_a^{-4}$$

donde o_{sf} =concentración de saturación de oxígeno disuelto en agua a 1 atm (mg/L) y T_a =temperatura absoluta (K). De acuerdo con esta ecuación, la saturación disminuye con el incremento de temperatura. Para aguas naturales comunes en climas templados, la

ecuación se usa para determinar que la concentración de oxígeno varía entre de 14.621 mg/L a 0°C a 6.413 mg/L a 40 °C. Dado un valor de concentración de oxígeno:

- Emplear el procedimiento del método de bisección tomando los valores iniciales de 0°C y 40 °C para determinar la temperatura con un error absoluto de 0.05°C . ¿Cuántas iteraciones se requerirían?
- Indicar los valores de T para el cual $o_{sf}=8, 10$ y 12 mg/L.

10.- Los ingenieros ambientales que estudian los efectos de la lluvia ácida deben determinar el valor del producto iónico del K_w (mol/L) como función de la temperatura. Los científicos sugieren la siguiente ecuación para modelar dicha relación:

$$-\log_{10} K_w = d + cT_a + b \log_{10} T_a + a/T_a$$

donde T_a es la temperatura absoluta (K), y a, b, c y d son parámetros. A partir de una muestra se determina que los parámetros corresponden a $a = -2.979 \times 10^5$, $b = -4.852 \times 10^3$, $c = 3.685$ y $d = 1.192 \times 10^4$.

Dado un valor del producto iónico:

- Usar el procedimiento del método de bisección tomando los valores iniciales de 273.15F y 313.15K para determinar la temperatura absoluta con un error absoluto de 0.02K. ¿Cuántas iteraciones se requerirían?



La lluvia ácida contamina selvas y bosques, especialmente los situados a mayor altitud. Esta precipitación nociva roba los nutrientes esenciales del suelo a la vez que libera aluminio, lo que dificulta la absorción del agua por parte de los árboles. Los ácidos también dañan las agujas de las coníferas y las hojas de los árboles. Fotografía: National Geographic (Wikimedia Commons).

- Indicar los valores de T_a para el cual $K_w=3 \times 10^{-15}$, 5×10^{-15} y 7×10^{-15} moles/L.

2.9 Proyecto para grupo: El pH del agua

El pH del agua tiene gran importancia para los ingenieros ambientales. Es un indicador fisicoquímico de la calidad del agua y está relacionado con los procesos de corrosión en tubos por lluvia ácida. El Ph se relaciona con la concentración del ion de hidrógeno por la ecuación

$$\text{pH} = -\log_{10}[\text{H}^+]. \quad (2.15)$$

A su vez, el siguiente sistema de ecuaciones no lineales gobiernan las concentraciones de una mezcla de dióxido de carbono y agua para un sistema cerrado.

$$\begin{cases} K_1 = \frac{[\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]}{[\text{CO}_2]} \\ K_2 = \frac{[\text{H}^+][\text{CO}_3^{2-}]}{[\text{HCO}_3^-]} \\ K_w = [\text{H}^+][\text{OH}^-] \\ c_T = [\text{CO}_2] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}] \\ \text{Alk} = [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{OH}^-] - [\text{H}^+] \end{cases} \quad (2.16)$$

donde Alk = alcalinidad, c_T =total de carbón inorgánico, y las K son coeficientes de equilibrio. Las 5 incógnitas corresponden a $[\text{H}^+]$ =ion de hidrógeno, $[\text{HCO}_3^-]$ =bicarbonato, $[\text{CO}_3^{2-}]$ =carbonato, $[\text{CO}_2]$ =dióxido de carbono y $[\text{OH}^-]$ =ion hidroxilo.

- a) Demostrar partiendo de las 5 ecuaciones y haciendo $x = [\text{H}^+]$ que una forma de obtener x es calculando la raíz de:

$$f(x) = \text{Alk} - c_T(x/K_1 + K_2/x + 1)^{-1}(2K_2/x + 1) - K_w/x + x$$

Es decir, una función como variable independiente el ion de hidrógeno con los parámetros de alcalinidad, el carbón total inorgánico y de los coeficientes de equilibrio.

- b) Graficar en una hoja de cálculo Excel $f(x)$, para valores de $x > 0$ con los parámetros $\text{Alk} = 2 \times 10^{-3}$, $c_T = 3 \times 10^{-3}$, $K_1 = 10^{-6.3}$, $K_2 = 10^{-10.3}$ y $K_w = 10^{-14}$. Ajustar el

intervalo hasta que pueda apreciarse la raíz (corte con el eje x). En la misma hoja colocar celdas que permitan ajustar los parámetros

- c) Calcular la raíz de la función insertando en una hoja de cálculo Excel cualesquiera de los métodos cerrados o abiertos desarrollados en el capítulo hasta que $\epsilon_a < 10^{-6}\%$.
- d) Estimar una solución para el sistema de ecuaciones a partir de la raíz de $f(x)$. Indicar las soluciones en la hoja de cálculo que muestra la gráfica y la raíz. Nótese que puede obtener distintas soluciones para diversos valores de los parámetros.
- e) Calcular el pH de las soluciones. Indicar el valor en la hoja de cálculo que muestra la gráfica y la raíz. Nótese que puede obtener distintos valores de pH para diversos valores de los parámetros.
- f) Analizar los resultados numéricos obtenidos.
- g) Realizar una investigación resaltando la importancia del estudio del pH en el campo de la ingeniería ambiental.

CAPÍTULO 3

AJUSTE DE CURVAS POR MÍNIMOS CUADRADOS

En este capítulo se estudiarán las técnicas numéricas que permiten construir modelos matemáticos a partir de un conjunto de datos.

3.1. Modelos matemáticos de un conjunto de datos.

3.2. Regresión lineal.

3.3. Regresión polinomial.

3.4. Regresiones no lineales y su linealización.

3.5. Ajuste de curvas con funciones sinusoidales.

3.6. Interpolación polinomial.

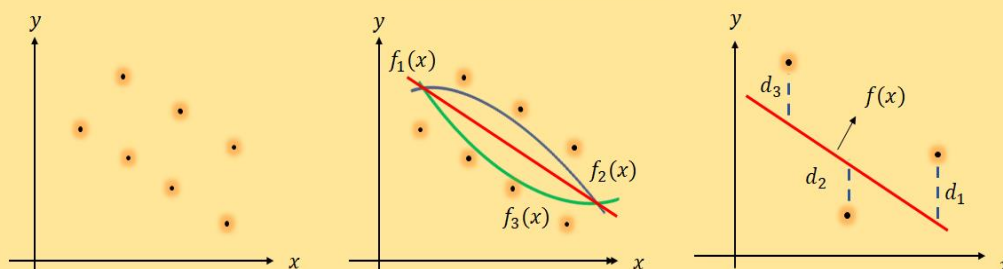
3.7. Ejercicio de aplicación: Incremento de microplásticos.

3.8. Ejercicios propuestos.

3.9. Proyecto para grupo: Producto iónico del agua.



Desechos plásticos en las costas de las islas Galápagos. La luz del sol, el viento y las olas rompen estos grandes desechos plásticos en trozos cada vez más pequeños hasta que se convierten en microplásticos (partículas de menos de 5 milímetro de diámetro). Dadas las concentraciones de microplásticos en el agua durante varios años, se pueden predecir (con amplia exactitud) las concentraciones a futuro mediante los modelos matemáticos. Fotografía: F. Oberhaensli (OIEA).



Ajuste de curva de un conjunto de datos.

3.1 Modelos matemáticos de un conjunto de datos

Una técnica fundamental en la ciencia moderna consiste en recopilar datos, organizarlos y luego describirlos por medio de un modelo matemático $y = f(x)$. Los datos pueden ser el resultado de algún experimento u observación. En este contexto, si se desarrolla un modelo matemático con el fin de representar datos reales, este debe esforzarse por alcanzar dos objetivos a menudo contradictorios: **precisión y sencillez**. Es decir, el modelo deberá ser lo bastante sencillo como para poder manejarlo, pero también preciso como para producir resultados significativos (Larson y Edwards, 2010).

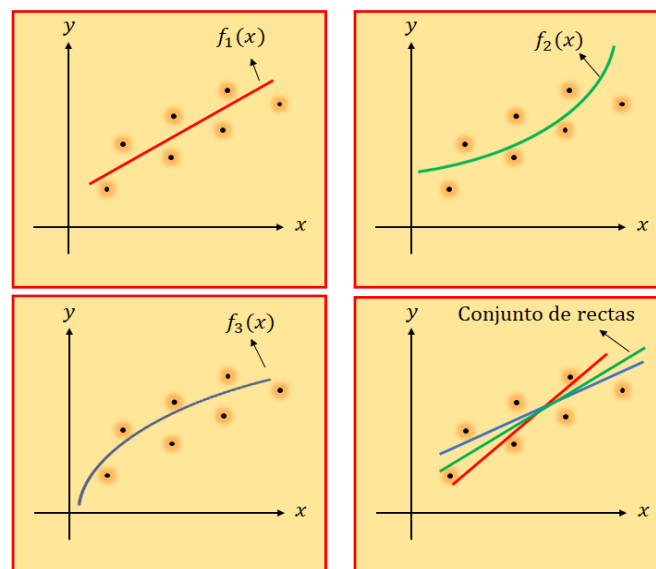


FIGURA 3.1. Función de aproximación.

Una estrategia apropiada para construir un modelo matemático de naturaleza estadística, consiste en obtener una función de aproximación $f(x)$ que se ajuste a la forma o la tendencia general de los datos sin coincidir necesariamente en todos los puntos tal y como se muestra en la Fig.3.1. Nótese que las curvas que representan a diversas funciones (inclusive de la misma familia) pueden atravesar los puntos sin coincidir con ellos. Por ende, es necesario establecer un método que permita excluir algunas de ellas y de esta manera poder elegir la función de ajuste adecuado. En este

sentido, existe un método que suele encontrarse en la literatura como **método de regresión por mínimos cuadrados** el cual se presenta a continuación.

3.1.1 Métodos de mínimos cuadrados

Es un método que consiste en obtener una curva que **minimice** la discrepancia entre los puntos y el modelo representado por dicha curva, tal y como se observa en el gráfico del lado izquierdo de la Fig. 3.2 (caso particular del ajuste a una recta). Por consiguiente, como medida de que tan bien se ajusta un modelo $y = f(x)$ a la colección de puntos $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), \dots, (x_n, y_n)\}$ se pueden sumar los cuadrados de las diferencias entre los valores reales y los valores dados por el modelo para obtener la **suma de los cuadrados de los errores o errores cuadráticos** (Larson y Edwards, 2010)

$$S_r = \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i)]^2 \quad (3.1)$$

Gráficamente, S_r puede interpretarse como la suma de los cuadrados de las distancias verticales entre la gráfica de f y los puntos dados en el plano (los puntos de los datos). Es de resaltar que antes de aplicar este método debe escogerse la curva que se va a ajustar al conjunto de datos o de puntos dados.

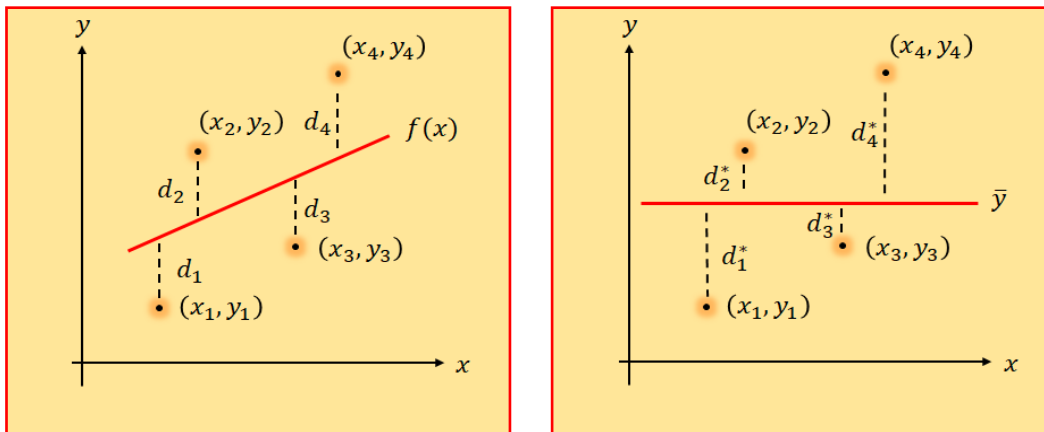


FIGURA 3.2. Suma de los cuadrados de los errores y dispersión de los datos.

La eficiencia del ajuste de la curva escogida (obtenida por el método de mínimos cuadrados) lo cuantifica el **coeficiente de determinación** R^2 que se calcula como:

$$R^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} \quad (3.2)$$

donde S_t (**medida de dispersión de los datos**) es la suma de los cuadrados de las distancias verticales entre el valor promedio de \bar{y} y los puntos de los datos (ver gráfico del lado derecho de la Fig. 3.2)

$$S_t = \sum_{i=1}^n [y_i - \bar{y}]^2 \quad (3.3)$$

Un ajuste perfecto viene dado por $S_r = 0$ y $R^2 = 1$ lo que significa que la curva explica el 100% de la variabilidad de los datos. No obstante, si $R^2 = 0$ y $S_t = S_r$ el ajuste no representa alguna mejora.

3.2 Regresión lineal

La regresión lineal es el ajuste de aproximación por mínimos cuadrados a una línea recta de un conjunto de observaciones definidas por puntos: $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$. La recta de ajuste viene dada por:

$$f(x) = ax + b \quad \text{con} \quad a = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \quad (3.4)$$

$$b = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n y_i + a \sum_{i=1}^n x_i \right)$$

donde los coeficientes a y b representan la pendiente y la intercepción con el eje y se obtiene de minimizar la suma de los cuadrados de los residuos (**ver Ap. B**).

$$S_r = \sum_{i=1}^n [y_i - b - ax_i]^2 \quad (3.5)$$

El error estándar de aproximación $S_{y/x}$ es el que indica el error para los valores predichos por y correspondientes a los valores de x y así mismo permite cuantificar la dispersión alrededor de la línea de regresión. Este se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}} \quad (3.6)$$

La bondad del ajuste se determina por la Ec 3.2.

Ejemplo 3.1

Concentración de CO₂ en la atmósfera

En la tabla se muestra la concentración de dióxido de carbono (en partes por millón) presente en la atmósfera terrestre a lo largo de algunos años. Se sabe que el dióxido de carbono es el principal gas de efecto invernadero. (fuente: observatorio Mauna Loa Hawai).

t(Año)	1992	1995	1998	2001	2004
CO ₂ (ppm)	356.65	360.99	366.46	371.12	377.38

- a) Construir un ajuste lineal representando como y la concentración de dióxido de carbono y x el tiempo, donde $x = 0$ corresponde a 1992.

Paso I: Redefinir las variables, esto es haciendo $t = x$ y $\text{CO}_2 = y$. Dado que $t = 1992$ corresponde a $x = 0$, se tiene que:

x	0	3	6	9	12
y	356.65	360.99	366.46	371.12	377.38

Nótese que el número de puntos corresponde a $n = 5$

Paso II: Calcular las cantidades

$$\sum_{i=1}^5 x_i = 0 + 3 + 6 + 9 + 12 = 30$$

$$\sum_{i=1}^5 x_i^2 = 0^2 + 3^2 + 6^2 + 9^2 + 12^2 = 270$$

$$\sum_{i=1}^5 y_i = 356.65 + 360.99 + 366.46 + 371.12 + 377.38 = 1832.6$$

$$\sum_{i=1}^5 x_i y_i = [0(356.65) + 3(360.99) + 6(366.46) + 9(371.12) + 12(377.38)] = 11150.37$$

Los promedios

$$\bar{x} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 x_i = \frac{1}{5}(30) = 6 \quad \text{y} \quad \bar{y} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 y_i = \frac{1}{5}(1832.6) = 366.520$$

Paso III: Emplear las fórmulas para el ajuste lineal dadas en la Ec.3.4.

$$a = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} = \frac{(5)(11150.37) - (30)(1832.6)}{(5)(270) - (30)^2} = 1.720$$

$$b = \frac{1}{n} \left(\sum x_i - a \sum y_i \right) = 6 - (1.71967)(366.52) = 356.202$$

Por lo tanto, el ajuste por mínimos cuadrados es:

$$y(x) = 1.720x + 356.202$$

Paso IV: Estimar los errores en el ajuste. Para ello calcular las cantidades dadas en la Ec. 3.3 y Ec .3.5

$$S_t = \sum_{i=1}^5 [y_i - 366.52]^2 = (97.417 + 30.581 + 0.004 + 21.160 + 117.940)^2 = 267.101$$

$$S_r = \sum_{i=1}^5 [y_i - 356.20200 - 1.71967x_i]^2 = (0.201 + 0.138 + 0.004 + 0.312 + 0.294)^2 = 0.948$$

En efecto el error estándar (Ec. 3.6) y el coeficiente de determinación (Ec. 3.2) vienen dado por:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}} = \sqrt{\frac{0.948}{5-2}} = 0.562 \quad y \quad R^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} = \frac{267.101 - 0.948}{267.01} = 0.996$$

Los resultados indican que el modelo lineal $y = 1.720x + 356.202$ explica el 99.65% de la variabilidad de los datos. A su vez R^2 es un valor próximo a 1 indicando que el modelo lineal proporciona un buen ajuste. La Fig. 3.3 muestra la tabla de datos y los cálculos del ajuste lineal utilizando una hoja de cálculo en Excel.

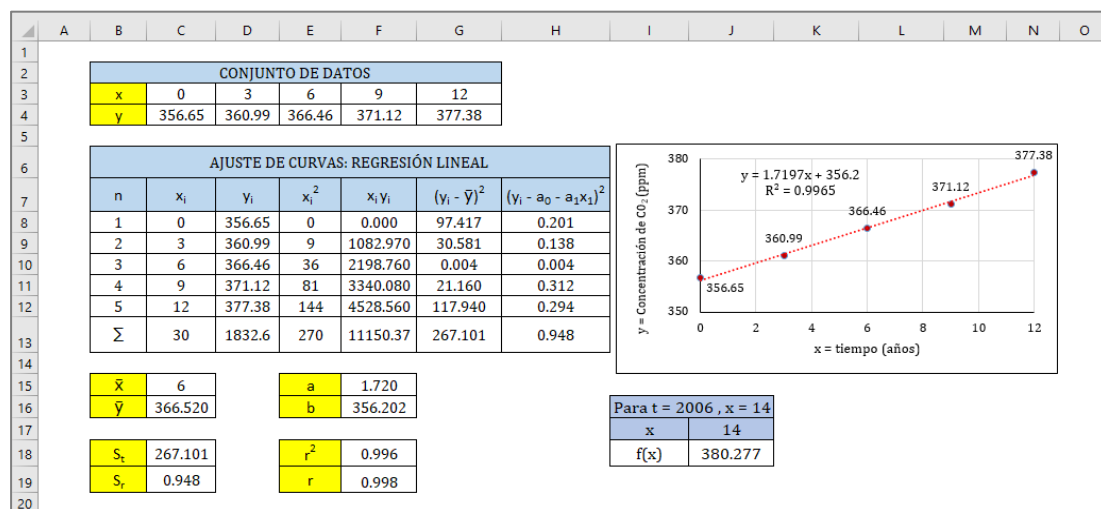


FIGURA 3.3. Gráfica de datos y línea de ajuste. El ajuste se realizó con la hoja de cálculo Excel.

Según el ajuste lineal la tasa de incremento de dióxido de carbono por año lo proporciona la pendiente de la gráfica y corresponde a 1.720 ppm/año.

- b) Utilizar el modelo para predecir la concentración de dióxido de carbono en el año 2006.

Dado $x = 12$ corresponde al año 2004. Se tiene que para el año 2006 el valor de $x = 14$. Así al evaluar en el modelo lineal se obtiene lo siguiente:

$$y = 1.720(14) + 356.202 = 380.277$$

Al extrapolar para el año 2006 se tiene que la concentración aproximada de dióxido de carbono es 380.277 ppm.

3.3 Regresión polinomial

La regresión polinomial por mínimos cuadrados es el ajuste de un conjunto de datos a un polinomio de m-ésimo grado:

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots + a_mx^m. \quad (3.7)$$

Los coeficientes son solución del sistema de ecuaciones ($m \times m$)

$$\begin{aligned} na_0 + a_1 \sum x_i + a_2 \sum x_i^2 + \dots + a_m \sum x_i^m &= \sum y_i \\ a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 + a_2 \sum x_i^3 + \dots + a_m \sum x_i^{m+1} &= \sum x_i y_i \\ a_0 \sum x_i^2 + a_1 \sum x_i^3 + a_2 \sum x_i^4 + \dots + a_m \sum x_i^{m+2} &= \sum x_i^2 y_i \quad (3.8) \\ \dots & \\ a_0 \sum x_i^m + a_1 \sum x_i^{m+1} + a_2 \sum x_i^{m+2} + \dots + a_m \sum x_i^{2m} &= \sum x_i^m y_i \end{aligned}$$

donde todas las sumatorias van desde $i = 1$ hasta n . El sistema de ecuaciones se obtiene al minimizar:

$$S_r = \sum_{i=1}^n [y_i - a_0 - a_1x - a_2x^2 - a_3x^3 - \dots - a_mx^m]^2 \quad (3.9)$$

El error estándar de aproximación $S_{y/x}$ se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n - (m + 1)}} \quad (3.10)$$

y la bondad del ajuste se determina por la Ec 3.2.

3.3.1 Regresión cuadrática

En el caso de particular en el que $m = 2$ en la Ec. 3.7, el ajuste corresponde a una función cuadrática (polinomio de grado 2) y la representación gráfica es una parábola tal y como muestran los gráficos de la Fig. 3.4.

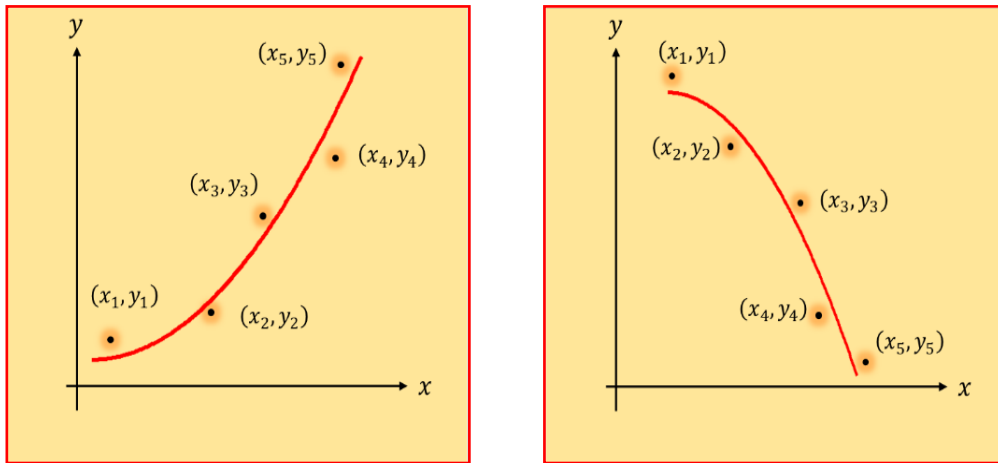


FIGURA 3.4. Ajuste de datos a una parábola.

Para un conjunto de observaciones definidas por puntos $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ la función cuadrática es:

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2. \quad (3.12)$$

Los coeficientes a_0 , a_1 y a_2 se desprenden de la Ec. 3.8 para $m = 2$ y son solución del sistema de ecuaciones lineales 3×3 .

$$\begin{aligned}
 na_0 + a_1 \sum x_i + a_2 \sum x_i^2 &= \sum y_i \\
 a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 + a_2 \sum x_i^3 &= \sum x_i y_i \\
 a_0 \sum x_i^2 + a_1 \sum x_i^3 + a_2 \sum x_i^4 &= \sum x_i^2 y_i
 \end{aligned} \quad (3.13)$$

En efecto, el problema de determinar un polinomio de segundo grado por mínimos cuadrados es equivalente a resolver un sistema de tres ecuaciones lineales simultáneas.

Ejemplo 3.2**Concentración de CO₂ en la atmósfera**

Dados los datos en el ejemplo anterior: Construir un ajuste cuadrático

Paso I: A partir de los datos dados y procediendo de manera similar que el ejemplo anterior se desprende:

$$\sum_{i=1}^5 x_i = 30, \quad \sum_{i=1}^5 x_i^2 = 270, \quad \sum_{i=1}^5 x_i^3 = 2700, \quad \sum_{i=1}^5 x_i^4 = 28674$$

$$\sum_{i=1}^5 y_i = 1832.6, \quad \sum_{i=1}^5 x_i y_i = 11150.37, \quad \sum_{i=1}^5 x_i^2 y_i = 100844.91$$

Los promedios:

$$\bar{x} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 x_i = \frac{1}{5} (30) = 6 \quad y \quad \bar{y} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 y_i = \frac{1}{5} (1832.6) = 366.52$$

Paso II: Con las cantidades previamente calculadas se construye el sistema de ecuaciones empleando la Ec. 3.13, esto es:

$$5a_0 + 30a_1 + 270a_2 = 1832.6$$

$$30a_0 + 270a_1 + 2700a_2 = 11150.37$$

$$270a_0 + 2700a_1 + 28674a_2 = 100844.91$$

El sistema tiene como solución (**ver ap. A**) $a_0 = 356.6349$, $a_1 = 1.4311$ y $a_2 = 0.0240$. Por lo tanto (al reemplazar en la Ec. 3.12) la ecuación cuadrática por mínimos cuadrados en este caso es:

$$f(x) = 356.6349 + 1.4311x + 0.0240x^2$$

Paso III: Estimar los errores en el ajuste. Para ello se calcula las siguientes cantidades

$$S_t = \sum_{i=1}^5 [y_i - 366.52]^2 = 267.101$$

$$S_r = \sum_{i=1}^5 [y_i - 356.6349 + 1.4311x_i + 0.0240x_i^2]^2 = 0.292$$

En efecto el error estándar estimado al usar la Ec. 3.10 con $m = 2$ y el coeficiente de determinación vienen dados por

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n - (m + 1)}} = \sqrt{\frac{0.292}{5 - 3}} = 0.382 \quad y \quad R^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} = \frac{267.101 - 0.292}{267.101} = 0.999$$

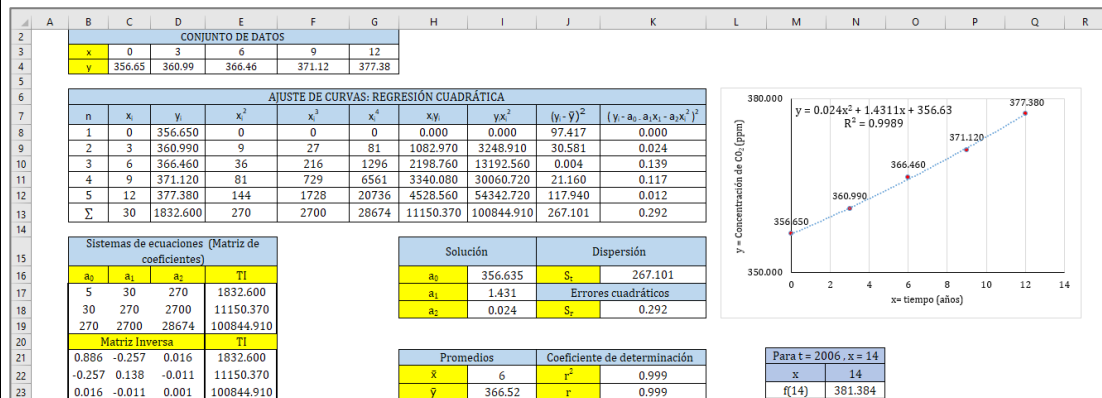


FIGURA 3.5. Gráfica de datos y ajuste cuadrático. El ajuste se realizó con la hoja de cálculo Excel.

Los resultados indican que el modelo cuadrático $f(x) = 356.6349 + 1.4311x + 0.0240x^2$ explica el 99.9% de la variabilidad de los datos. La Fig. 3.5 muestra la tabla de datos y los cálculos del ajuste cuadrático empleando una hoja de cálculo en Excel.

Nótese que al comparar el modelo lineal con el modelo cuadrático se tiene que este último proporciona una mayor precisión dado que se ajusta ligeramente más a los datos, pero el modelo lineal proporciona una mayor sencillez y facilita la interpretación del resultado. Dependiendo del conocimiento del fenómeno a estudiar se puede elegir de forma conveniente el modelo a utilizar.

- a) Usar el modelo para predecir la concentración de dióxido de carbono para el año 2006.

Evaluando en $x = 14$ resulta

$$y = 356.6349 + 1.4311(14) + 0.0240(14)^2 = 381.384$$

Al extrapolar para el año 2006 se tiene que la concentración aproximada de dióxido de carbono es 381.384 ppm.

3.4 Regresiones no lineales y su linealización

La regresión no lineal es el ajuste de un conjunto de datos a funciones no lineales.

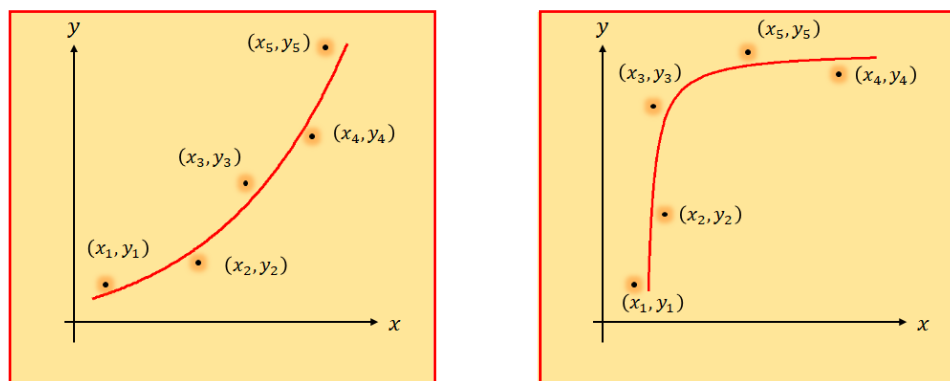


FIGURA 3.6. Ajuste de datos a funciones no lineales.

Entre las funciones más comunes se encuentran la función exponencial, función potencial y función de razón de crecimiento

$$f(x) = \alpha_1 e^{\beta_1 x}, \quad f(x) = \alpha_2 x^{\beta_2}, \quad f(x) = \alpha_3 \frac{x}{\beta_3 + x} \quad (3.14)$$

respectivamente, siendo α y β constantes. Este tipo de ajuste se recomienda cuando los datos cambian de manera abrupta y no se aprecia linealidad entre los mismos tal y como muestran los gráficos de la Fig. 3.6.

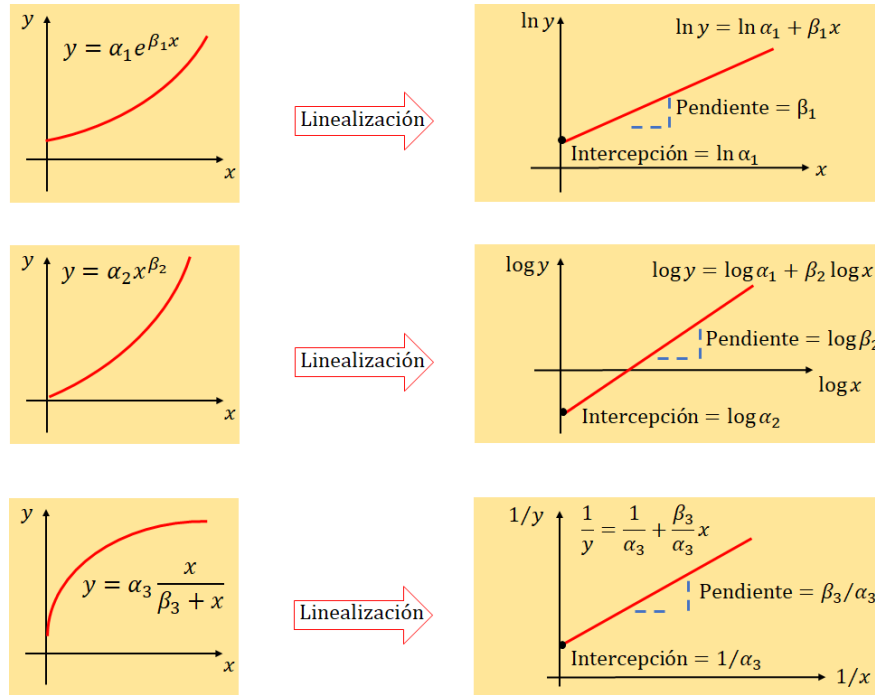


FIGURA 3.7. Linealización de funciones no lineales.

Para aplicar el criterio de los mínimos cuadrados a las funciones no lineales se recomienda transformar las ecuaciones en una forma lineal, tal y como muestran los gráficos de la Fig. 3.7. Después, se utiliza la regresión lineal simple para ajustar las ecuaciones a los datos. Por ejemplo, la función exponencial se linealiza al aplicar logaritmo natural, esto es:

$$y = \alpha_1 e^{\beta_1 x} \Rightarrow \ln y = \ln \alpha_1 + \beta_1 x \quad (3.15)$$

Así una gráfica del logaritmo de y contra x dará una línea recta con pendiente β_1 y una intercepción con el eje de las ordenadas igual a $\ln \alpha_1$. Ahora bien, para un

conjunto de observaciones definidas por puntos $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ la exponencial de ajuste viene dada por:

$$f(x) = \alpha_1 e^{\beta_1 x} \quad \text{con} \quad \beta_1 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \ln y_i - \overline{\ln y} \sum_{i=1}^n x_i}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - \bar{x} \sum_{i=1}^n x_i} \quad (3.16)$$

$$\alpha_1 = e^{\overline{\ln y} - \beta_1 \bar{x}}$$

Donde los coeficientes α_1 y β_1 se obtienen de minimizar la suma de los cuadrados de los residuos de

$$S_r = \sum_{i=1}^n [\ln y_i - \ln \alpha_1 - \beta_1 x_i]^2. \quad (3.17)$$

La bondad del ajuste se determina por la Ec. 3.2 siendo la dispersión de los datos equivalente a

$$S_t = \sum_{i=1}^n [\ln y_i - \overline{\ln y}]^2. \quad (3.18)$$

Ejemplo 3.3

Producción de plástico a nivel mundial

En la tabla se muestra la producción de plástico (en millones de toneladas métricas) a nivel mundial en algunos años (fuente: Statista Plastics Europe).

t(Año)	1976	1989	2002	2014	2019
P_p (MTm)	50	100	200	311	368

- a) Construir un ajuste exponencial representando como y la producción de plástico y x el tiempo, donde $x = 0$ corresponde a 1976.

Paso I: Redefinir las variables haciendo $t = x$ y $P_p = y$. Dado que $t = 1976$ corresponde a $x = 0$, se tiene que:

x	0	13	26	38	43
$\ln y$	$\ln(50)$	$\ln(100)$	$\ln(200)$	$\ln(311)$	$\ln(368)$

donde $\ln P_p = \ln y$

Paso II: Calcular las cantidades

$$\sum_{i=1}^5 x_i = 0 + 13 + 26 + 38 + 43 = 120$$

$$\sum_{i=1}^5 x_i^2 = 0^2 + 13^2 + 26^2 + 38^2 + 43^2 = 4138$$

$$\sum_{i=1}^5 x_i \ln y_i = 0 \ln(50) + 13 \ln(100) + 26 \ln(200) + 38 \ln(311) + 43 \ln(368) = 669.783$$

Los promedios

$$\bar{x} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 x_i = \frac{1}{5} (120) = 24 \quad \text{y} \quad \overline{\ln y} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 \ln y_i = \frac{1}{5} (25.3634) = 5.093$$

Paso III: Emplear las fórmulas dadas en la Ec.3.16 para el ajuste exponencial

$$\beta_1 = \frac{\sum x_i \ln y_i - \overline{\ln y} \sum x_i}{\sum x_i^2 - \bar{x} \sum x_i} = \frac{(669.7835) - (5.0927)(120)}{(4138) - (24)(120)} = 0.0466$$

$$\alpha_1 = e^{\overline{\ln y} - \beta_1 \bar{x}} = e^{(5.0927) - (0.04663)(24)} = 53.172$$

Por lo tanto, el ajuste exponencial por mínimos cuadrados es:

$$y = 53.172e^{0.0466x}$$

Paso IV: Estimar la bondad del ajuste. Para ello calcular las cantidades

$$S_t = \sum_{i=1}^5 [\ln y_i - \overline{\ln y}]^2 = (1.394 + 0.238 + 0.042 + 0.419 + 0.665)^2 = 2.758$$

$$S_r = \sum_{i=1}^5 [\ln y_i - \ln(53.1719) - (0.04663) \ln x_i]^2$$

$$= (0.004 + 0.001 + 0.013 + 0.000 + 0.005)^2$$

$$= 0.022$$

En efecto el coeficiente de determinación viene dado por:

$$R^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} = \frac{2.7575 - 0.0221}{2.7575} = 0.992$$

Los resultados indican que el modelo exponencial $y = 53.172e^{0.0466x}$ explica el 99.19% de la variabilidad de los datos. A su vez R^2 es un valor próximo a 1 indicando que el modelo exponencial proporciona un buen ajuste. La Fig. 3.8 muestra la tabla de datos y los cálculos del ajuste exponencial empleando una hoja de cálculo en Excel.

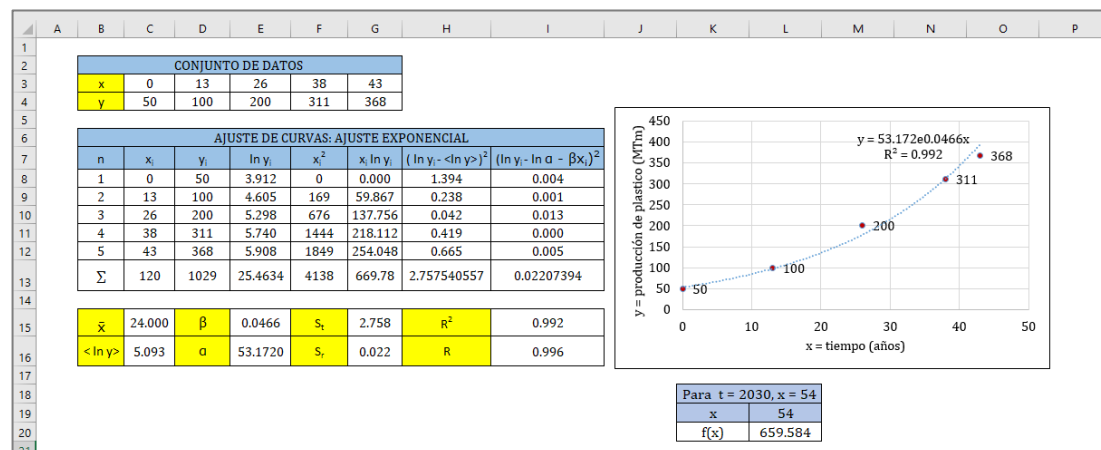


FIGURA 3.8. Gráfica de datos y ajuste exponencial. El ajuste se realizó con la hoja de cálculo Excel.

Según el ajuste exponencial la tasa de incremento de producción de plástico lo proporciona el valor de β_1 que corresponde a 46630 toneladas métricas por año.

- b) Utilizar el modelo para predecir el incremento de producción de plástico para el año 2030.

Dado $x = 0$ corresponde al año 1976. Se tiene que para el año 2030 el valor de $x = 2030 - 1976 = 54$. Así al evaluar en el modelo exponencial resulta

$$y = 53.172e^{0.0466(54)} = 659.584 \text{ MTm}$$

Al extrapolar para el año 2030 se tiene que la producción de plástico tendrá un valor aproximado de aproximado 660 MTm.

3.5 Ajuste de curvas con funciones sinusoidales

La regresión sinusoidal por mínimos cuadrados es el ajuste de un conjunto de datos a una función trigonométrica de la forma:

$$f(x) = A_0 + A_1 \cos(\omega x) + A_2 \sin(\omega x). \quad (3.19)$$

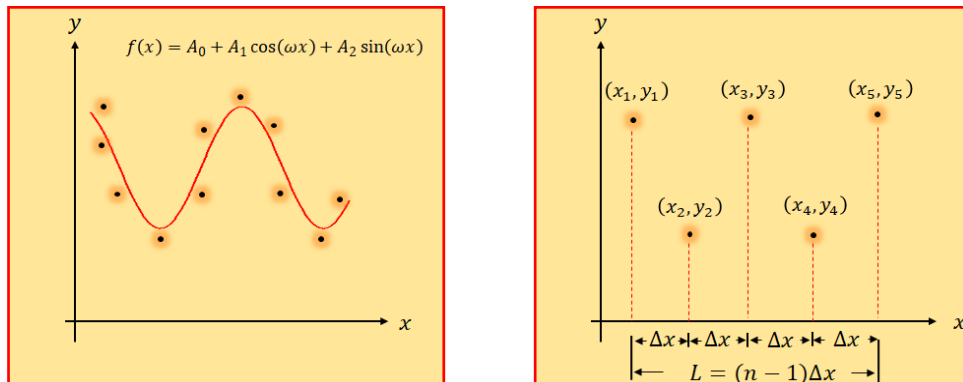


FIGURA 3.9. Regresión sinusoidal.

Este tipo de ajuste se recomienda cuando los datos presentan una tendencia oscilante periódica y no se aprecia linealidad entre los mismos, tal y como se muestra en el gráfico izquierdo de la Fig. 3.9.

Ahora bien, en el caso particular de un conjunto de observaciones definidas por puntos $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ donde la distancia de los mismos a lo largo de la coordenada x sea uniforme (Δx) y de longitud total $L = (n - 1)\Delta x$ (obsérvese gráfico de lado derecho de la Fig. 3.9), se cumple que los coeficientes en la Ec. 3.19 vendrán dados por

$$A_0 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i, \quad A_1 = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n y_i \cos(\omega_0 x_i), \quad B_1 = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n y_i \sin(\omega_0 x_i) \quad (3.20)$$

siendo $\omega_0 = 2\pi/n\Delta x$. Las cantidades A_0, A_1 y B_1 reciben el nombre de **coeficientes de Fourier** y se obtienen de minimizar la suma de los cuadrados de los residuos

$$S_r = \sum_{i=1}^n [y_i - A_0 - A_1 \cos(\omega_0 x_i) - A_2 \sin(\omega_0 x_i)]^2 \quad (3.21)$$

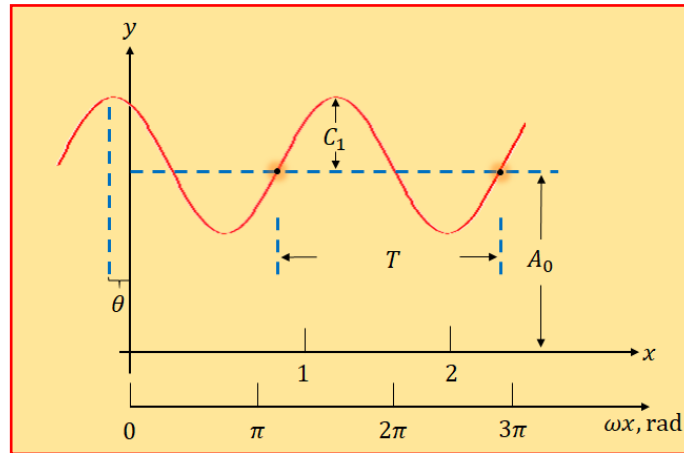


Figura 3.10. Funciones de ajuste seno y cosenos.

Por último, una forma simplificada y equivalente de reescribir la función Ec. 3.19 es

$$f(x) = A_0 + C_1 \cos(\omega_0 x + \theta) \quad \text{o} \quad f(x) = A_0 + C_1 \sin(\omega_0 x + \varphi) \quad (3.22)$$

donde:

$$C_1 = \sqrt{A_1^2 + A_2^2}, \quad \theta = \begin{cases} \tan^{-1}(-A_2/A_1) & \text{si } A_1 > 0 \\ \pi & \text{si } A_1 = 0 \\ \tan^{-1}(-A_2/A_1) + \pi & \text{si } A_1 < 0 \end{cases} \quad y \quad \varphi = \theta + \frac{\pi}{2}. \quad (3.23)$$

Así cuatro parámetros sirven para caracterizar la senoide (Fig. 3.10). El valor medio A_0 establece la altura promedio entre las abscisas, la amplitud C_1 especifica la altura de oscilación, la frecuencia angular ω_0 caracteriza con qué frecuencia se presentan los ciclos y el corrimiento de fase θ parametriza en qué extensión la senoide está corrida horizontalmente. Este último puede medirse como la distancia en radianes desde $x = 0$ hasta el punto donde la función seno o coseno empieza un nuevo ciclo.

Ejemplo 3.4

Temperatura en la ciudad de Miami

En la tabla se muestran las temperaturas máximas (en grados Fahrenheit) registrada en cada mes del año en la ciudad de Miami (fuente: NOAA.)

t(meses)	E	F	M	A	M	J	J	A	S	O	N	D
$T_m(^{\circ}\text{F})$	76.5	77.7	80.7	83.8	87.2	89.5	90.9	90.6	89.0	85.4	81.2	77.5

Construir un ajuste trigonométrico de la forma $f(x) = A_0 + C_1 \cos(\omega_0 x + \theta)$ representando como y la temperatura y x el tiempo, donde $x = 1$ corresponde al mes de enero.

Paso I: Redefinir las variables, esto es $t = x$ y $T_m = y$. Dado que $x = 1$ corresponde al mes de enero se tiene:

x	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
y	76.5	77.7	80.7	83.8	87.2	89.5	90.9	90.6	89.0	85.4	81.2	77.5

Nótese que $n = 12$ y $\Delta x = 1$. Así el valor de $\omega_0 = 2\pi/n\Delta x = \pi/6 = 0.5236$

Paso II: Calcular las cantidades

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{12} y_i \cos \omega_0 x_i &= 76.5 \cos\left(\frac{\pi}{6}\right) + 77.7 \cos\left(\frac{2\pi}{6}\right) + 80.7 \cos\left(\frac{3\pi}{6}\right) + 83.8 \cos\left(\frac{4\pi}{6}\right) + \\ &87.2 \cos\left(\frac{5\pi}{6}\right) + 89.5 \cos\left(\frac{6\pi}{6}\right) + 90.9 \cos\left(\frac{7\pi}{6}\right) + 90.6 \cos\left(\frac{8\pi}{6}\right) + \\ &89.0 \cos\left(\frac{9\pi}{6}\right) + 85.4 \cos\left(\frac{10\pi}{6}\right) + 81.2 \cos\left(\frac{11\pi}{6}\right) + 77.5 \cos\left(\frac{12\pi}{6}\right) = -35.3169\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{12} y_i \sin \omega_0 x_i &= 76.5 \sin\left(\frac{\pi}{6}\right) + 77.7 \sin\left(\frac{2\pi}{6}\right) + 80.7 \sin\left(\frac{3\pi}{6}\right) + 83.8 \sin\left(\frac{4\pi}{6}\right) + \\ &87.2 \sin\left(\frac{5\pi}{6}\right) + 89.5 \sin\left(\frac{6\pi}{6}\right) + 90.9 \sin\left(\frac{7\pi}{6}\right) + 90.6 \sin\left(\frac{8\pi}{6}\right) + \\ &89.0 \sin\left(\frac{9\pi}{6}\right) + 85.4 \sin\left(\frac{10\pi}{6}\right) + 81.2 \sin\left(\frac{11\pi}{6}\right) + 77.5 \sin\left(\frac{12\pi}{6}\right) = -25.0574\end{aligned}$$

Paso III: Calcular los coeficientes de Fourier empleando la Ec.3.20

$$A_0 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i = \frac{1}{12} (1010) = 84.1666$$

$$A_1 = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n y_i \cos(\omega_0 x_i) = \frac{2}{12} (-35.3169) = -5.8862$$

$$A_2 = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n y_i \sin(\omega_0 x_i) = \frac{2}{12} (-25.0574) = -4.1762$$

Paso IV: Calcular los parámetros C_1 y θ empleando la Ec.3.23

$$\begin{aligned}C_1 &= \sqrt{A_1^2 + A_2^2} & \theta &= \tan^{-1}(-A_2/A_1) + \pi \\ &= \sqrt{(-5.8862)^2 + (-4.1762)^2} & &= \tan^{-1}[-(-4.1762)/(-5.8862)] + \pi \\ &= 7.2172 & &= 2.5245\end{aligned}$$

Así pues, el ajuste trigonométrico viene dado por:

$$f(x) = 84.1666 + 7.2172 \cos(0.5236x + 2.5245)$$

Paso IV: Estimar la bondad del ajuste. Para ello calcular las cantidades

$$S_t = \sum_{i=1}^{12} [y_i - \bar{y}]^2 = (58.778 + 41.818 + 12.018 + 0.134 + 9.201 + 28.444 + 45.338 + 41.338 + 23.361 + 1.521 + 8.801 + 44.444) = 315.2467$$

$$S_r = \sum_{i=1}^{12} [y_i - A_0 - A_1 \cos(\omega_0 x) - A_2 \sin(\omega_0 x)]^2 = (0.231 + 0.009 + 0.503 + 0.094 + 0.001 + 0.306 + 0.205 + 0.016 + 0.432 + 0.313 + 0.002 + 0.609) = 2.7206$$

En efecto el coeficiente de determinación viene dado:

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} = \frac{315.2467 - 2.7206}{315.2467} = 0.9914$$

Los resultados indican que el modelo trigonométrico $f(x) = 84.1666 + 7.2172 \cos(0.5236x + 2.5245)$ explica el 99.14% de la variabilidad de los datos. A su vez R^2 es un valor próximo a 1 indicando que el modelo sinusoidal proporciona un buen ajuste. La Fig. 3.11 muestra la tabla de datos y los cálculos del ajuste trigonométrico empleando una hoja de cálculo en Excel.

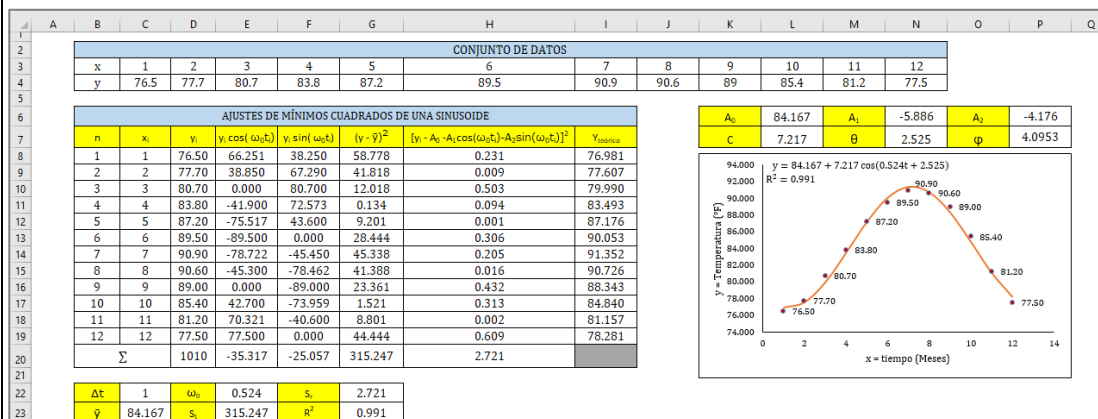


FIGURA 3.11. Gráfica de datos y ajuste trigonométrico. El ajuste se realizó con la hoja de cálculo Excel.

Según el ajuste trigonométrico $f(x) = 84.1666 + 7.2172 \cos(0.5236x + 2.5245)$ la temperatura promedio anual en la ciudad de Miami es 84.16 °F y la temperatura máxima alcanzada es 91.38 °F a mediados del mes de Julio mientras que las temperaturas más

bajas se registran en los meses de enero y diciembre con un valor de 76.5°F y 75.5°F respectivamente.

3.6 Interpolación polinomial

La interpolación es un proceso para estimar valores intermedios entre datos definidos por puntos. Particularmente, cuando se tienen dos puntos conocidos estos se pueden unir mediante una línea recta. Es decir, se puede utilizar la ecuación de la recta (polinomio de primer grado) para estimar diferentes puntos entre dos conocidos. De manera similar únicamente una parábola (polinomio de segundo grado) une tres puntos y únicamente una función cúbica une cuatro puntos tal y como muestran los gráficos de la Fig. 3.12.

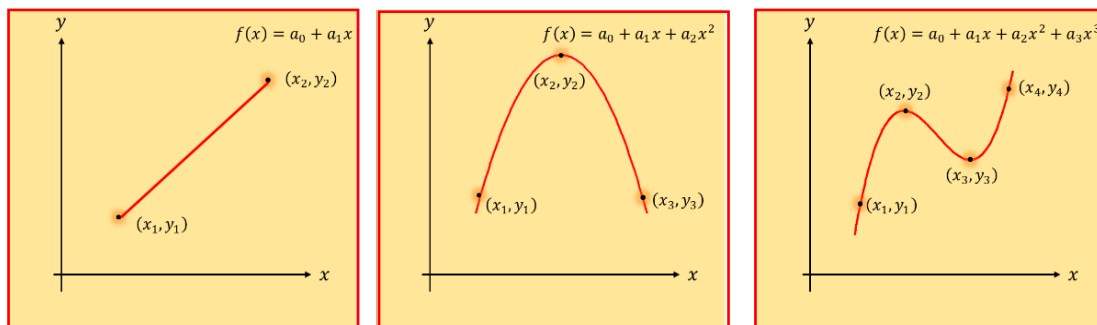


FIGURA 3.12. Casos particulares de unión de puntos por polinomios.

En términos generales dados $n + 1$ puntos, hay un solo polinomio de grado n que pasa a través de todos los puntos. La interpolación polinomial consiste en determinar el polinomio único de n –ésimo grado que se ajusta a $n + 1$ puntos. Este polinomio entonces proporciona una fórmula para calcular valores intermedios. No obstante, a pesar de la unicidad del polinomio existe una gran variedad de fórmulas matemáticas en las cuales puede expresarse el mismo. Por consiguiente, se presentará uno de los casos más populares y útiles en la literatura que lleva por nombre “El polinomio de interpolación de Newton en diferencia dividida” el cual se presenta a continuación.

3.6.1 Polinomio de interpolación de Newton en diferencia dividida

El polinomio de interpolación de Newton en diferencia dividida es una fórmula que permite ajustar un polinomio de $n - \text{ésimo}$ grado a $n + 1$ datos. El polinomio de interpolación es:

$$f_n(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + \cdots + b_n(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}) \quad (3.24)$$

Los coeficientes b_0, b_1, \dots, b_n , se obtienen a partir de los puntos asociados a los datos y vienen dados por

$$\begin{aligned} b_0 &= f(x_0) \\ b_1 &= f[x_1, x_0] \\ b_2 &= f[x_2, x_1, x_0] \\ &\vdots \\ b_n &= f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0] \end{aligned} \quad (3.25)$$

Donde las evaluaciones puestas entre paréntesis son **diferencias divididas finitas**, esto es:

$$\begin{aligned} \text{1ra. Diferencia} &\rightarrow f[x_i, x_j] = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_j - x_i} \\ \text{2 da. Diferencia} &\rightarrow f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_j] - f[x_j, x_k]}{x_i - x_k} \\ &\vdots \\ \text{n - ésima . Diferencia} &\rightarrow f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0] = \frac{f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_i] - f[x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_0]}{x_n - x_0} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Nótese que no es necesario que los datos utilizados en la Ec. 3.24 estén igualmente espaciados o que los valores de la abscisa se encuentren en orden ascendente.

Finalmente, el error porcentual en la interpolación se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$e_{a\%} \cong |f[x_{n+1}, x_n, x_{n-1}, \dots, x_0](x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)|100\% \quad (3.27)$$

Obsérvese que la expresión solicita un dato adicional para su aplicación.

Ejemplo 3.5

Estimación de concentración de oxígeno

En la tabla se muestra la concentración de oxígeno en mg/L (el cual es un indicador fisicoquímico de la calidad del agua) disuelto en agua dulce versus temperatura en °C a nivel del mar. (Fuente: Chapra y Canale)

T(°C)	0	8	16	24	32	40
O(mg/L)	14.62	11.84	9.87	8.42	7.31	6.41

Emplear interpolación de orden 1 hasta 3 para predecir O con T=12°C

Paso I: Redefinir las variables, esto es $T = x$ y $O = y$.

x	0	8	16	24	32	40
y	14.62	11.84	9.87	8.42	7.31	6.41

Paso II: Elegir la cantidad de puntos acorde al polinomio de interpolación, esto es:

Grado del polinomio (n)	Cantidad de punto ($n + 1$)	Puntos
1 primer grado	2	$P_0(8, 11.84)$ y $P_1(40, 6.41)$
2 segundo grado	3	$P_0(8, 11.84)$, $P_1(40, 6.41)$ y $P_2(32, 7.31)$
3 tercer grado	4	$P_0(8, 11.84)$, $P_1(40, 6.41)$, $P_2(32, 7.31)$ y $P_3(24, 8.42)$

Paso III: Calcular la primera, segunda y tercera diferencia dividida finita. Tomados P_0, P_1, P_2 y P_3 se desprende $x_0 = 8, f(x_0) = 11.84, x_1 = 40, f(x_1) = 6.41, x_2 = 32, f(x_2) = 7.31, x_3 = 24$ y $f(x_3) = 8.42$. Así aplicando las fórmulas de diferencias de 4.26 a los puntos tomados resulta:

$$f[x_1, x_0] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{6.41 - 11.84}{40 - 8} = -0.170$$

$$f[x_2, x_1] = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} = \frac{7.31 - 6.41}{32 - 40} = -0.113$$

$$f[x_3, x_2] = \frac{f(x_3) - f(x_2)}{x_3 - x_2} = \frac{8.42 - 7.31}{24 - 32} = -0.139$$

$$f[x_2, x_1, x_0] = \frac{f[x_2, x_1] - f[x_1, x_0]}{x_2 - x_0} = \frac{-0.1125 - (-0.1697)}{32 - 8} = 2.383 \times 10^{-3}$$

$$f[x_3, x_2, x_1] = \frac{f[x_3, x_2] - f[x_2, x_1]}{x_3 - x_0} = \frac{-0.1388 - (-0.1125)}{24 - 8} = 1.641 \times 10^{-3}$$

$$f[x_3, x_2, x_1, x_0] = \frac{f[x_3, x_2, x_1] - f[x_2, x_1, x_0]}{x_3 - x_0} = \frac{0.0016 - 0.0024}{24 - 8} = -4.639 \times 10^{-5}$$

Paso IV: Calcular los coeficientes b_0, b_1, b_2 y b_3 empleando las fórmulas dadas en 3.25 esto es:

$$\begin{aligned} b_0 &= f(x_0) = 11.84 & ; & \quad b_1 = f[x_1, x_0] = -0.170 \\ b_2 &= f[x_2, x_1, x_0] = 2.383 \times 10^{-3} & ; & \quad b_3 = f[x_3, x_2, x_1, x_0] = -4.639 \times 10^{-5} \end{aligned}$$

Paso V: Construir los polinomios y evaluar en $x = 12$.

Para $n = 1$ tomados P_0 y P_1 , **interpolación lineal**. Acorde a la Ec. 3.24 y a la Ec.3.27 tomando adicionalmente a P_2 se tiene:

$$\begin{aligned} f(x) &= b_0 + b_1(x - x_0) = 11.84 - 0.170(x - 8) \\ &= 13.198 - 0.170x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} e_{a\%} &= |R_n|100\% = |f[x_2, x_1, x_0](x - x_0)(x - x_1)|100\% \\ &= |2.383 \times 10^{-3}(x - 8)(x - 40)|100\% \end{aligned}$$

Evaluyendo en $x = 12$

$$\begin{aligned} f(12) &= 13.198 - 0.170(12) = 11.161 \rightarrow \text{1ra. aproximación} \\ e_{a\%} &= |2.383 \times 10^{-3}(12 - 8)(12 - 40)|100\% = 26.688\% \end{aligned}$$

Para $n = 2$ tomados P_0, P_1 y P_2 , **interpolación cuadrática**. Acorde a la Ec. 3.24 y Ec.3.27 tomando adicionalmente a P_3 se tiene:

$$\begin{aligned} f(x) &= b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1) \\ &= 11.84 - 0.170(x - 8) - 0.002(x - 8)(x - 40) \\ &= 12.430 - 0.055x - 0.002x^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} e_{a\%} &= |R_n|100\% = |f[x_3, x_2, x_1, x_0](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)|100\% \\ &= |-4.639 \times 10^{-5}(x - 8)(x - 40)(x - 32)|100\% \end{aligned}$$

Evaluyendo en $x = 12$

$$\begin{aligned} f(12) &= 12.430 - 0.055(12) - 0.002(12)^2 = 10.894 \rightarrow \text{2da. aproximación} \\ e_{a\%} &= |-4.639 \times 10^{-5}(12 - 8)(12 - 40)(12 - 32)|100\% = 10.391\% \end{aligned}$$

Para $n = 3$ tomados P_0, P_1, P_2 , y P_3 **interpolación cúbica**. Acorde a la Ec. 3.24 y Ec.3.27 tomando adicionalmente a $P_4(16, 9.87)$ se tiene:

$$\begin{aligned} f(x) &= b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1) + b_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\ &= 11.84 - 0.170(x - 8) - 0.002(x - 8)(x - 40) \\ &\quad - 4.639 \times 10^{-5}(x - 8)(x - 40)(x - 32) \\ &= 12.942 - 0.147x + 0.002x^2 - 4.639 \times 10^{-5}x^3 \end{aligned}$$

$$e_{a\%} = |R_n|100\% = |f[x_4, x_3, x_2, x_1, x_0](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)|100\% \\ = |5.086 \times 10^{-7}(x - 8)(x - 40)(x - 32)(x - 24)|100\%$$

Siendo $f[x_4, x_3, x_2, x_1, x_0] = 5.086 \times 10^{-7}$. Por simplicidad se ha omitido el desarrollo del cálculo de la cuarta diferencia. Seguidamente al evaluar en $x = 12$

$$f(12) = 12.942 - 0.147(12) - 0.002(12)^2 - 4.639 \times 10^{-5}(12)^3 = 10.790 \\ \rightarrow \text{3ra. aproximación} \\ e_{a\%} = |5.086 \times 10^{-7}(12 - 8)(12 - 40)(12 - 32)(12 - 24)|100\% = 1.367\%$$

En resumen, el valor de la concentración de oxígeno O para una temperatura $T=12^\circ\text{C}$ predicho por interpolación de orden 1 hasta 3 se muestra en la Fig. 3.13. El polinomio de grado 3 mejora la interpolación comparándola con los polinomios de grado 2 y grado 1. El punto interpolado $P_i(12, 10.79)$ con $e_{a\%} = 1.367\%$ sigue la tendencia del comportamiento de los datos, proporcionando de esta manera una buena aproximación del mismo.

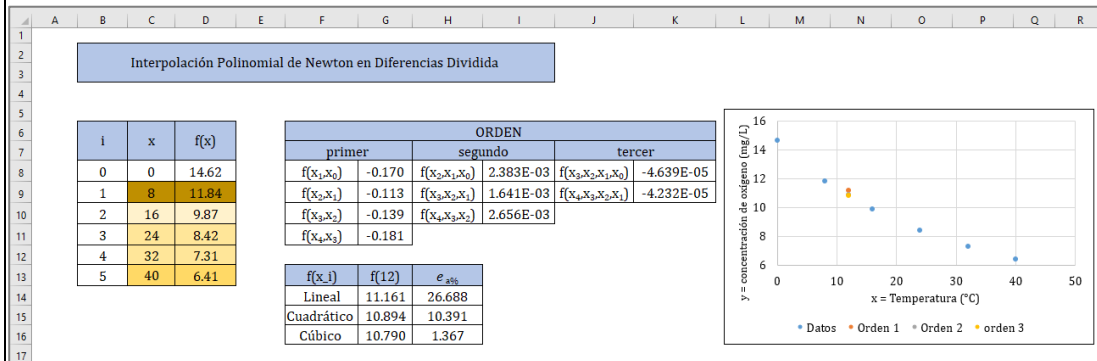


FIGURA 3.13. Conjunto de datos y punto interpolado. La interpolación se realizó con la hoja de cálculo Excel.

3.7 Ejercicio de aplicación: Incremento de microplásticos

En esta sección se procederá a realizar un estudio de caso para la construcción de un modelo matemático referente a datos de interés en el campo de la ingeniería ambiental. Lo anterior se realizará utilizando una hoja de cálculo Excel.

Ejemplo 2.9**Microplásticos en las Islas Galápagos**

Científicos del Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA) y Ecuador han realizado un estudio de más de 10 años para analizar la contaminación por microplásticos en el océano Pacífico tropical oriental (Costas de las Islas Galápagos). La Fig. 3.14 muestra las cifras a partir del año 2008 y sus proyecciones hasta el año 2100. Supóngase que la concentración de microplásticos desde año 2008 hasta el año 2020 corresponde a:

Año	2008	2010	2012	2014	2016	2018	2020
Cantidad de microplásticos por metros cúbicos	41.28	50.05	59.48	68.98	82.95	93.05	112.03

- Utilizar una hoja de cálculo Excel insertando la regresión exponencial para crear un modelo. En el modelo represente a y como la cantidad de microplásticos por metros cúbicos y a x el tiempo en año, donde $x = 0$ corresponde a 2008.
- Obtener el coeficiente de determinación y la bondad del ajuste. En base al resultado mencione si el ajuste es bueno.

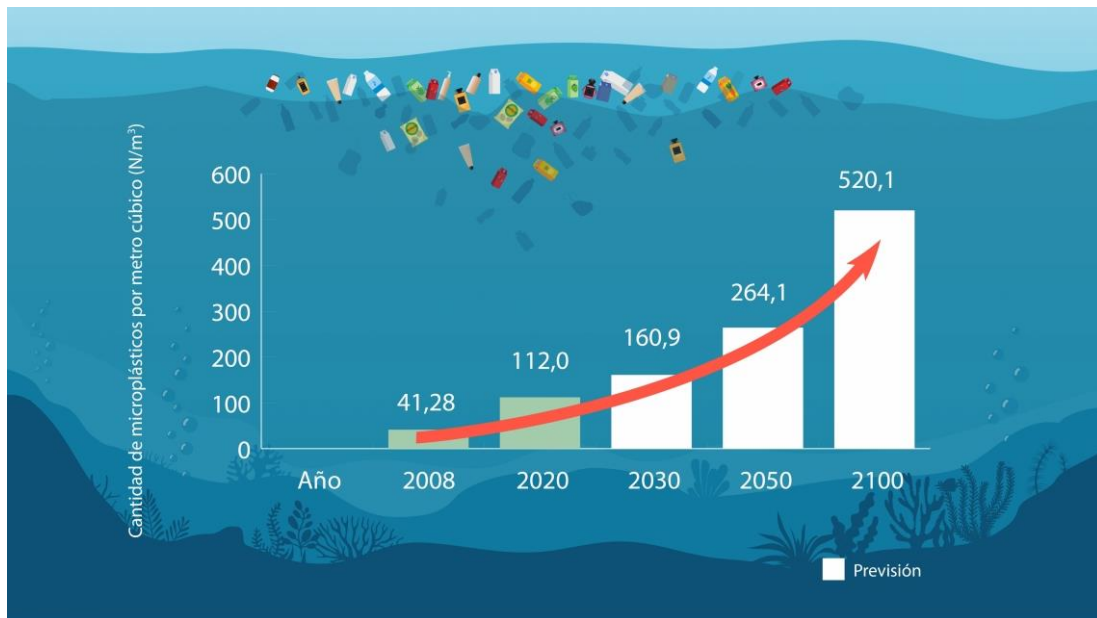


FIGURA 3.14. Cantidad de microplásticos en el Pacífico tropical oriental (Infografía y datos: OIEA).

Paso I: Personalizar la hoja de cálculo Excel para insertar los datos.

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1												
2		Ajuste Exponencial	$y(x) = ae^{\beta x} \quad \text{con} \quad \beta = \frac{\sum x_i \ln y_i - \bar{\ln y} \sum x_i}{\sum x_i^2 - \bar{x} \sum x_i} \quad y \quad \alpha = e^{\bar{\ln y} - \beta \bar{x}}; \quad R^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$									
3												
4												
5		Cantidad de microplásticos en el Pacífico tropical oriental										
6		Año	$C_M (N/m^3)$									
7		2008	41.28									
8		2010	50.05									
9		2012	59.48									
10		2014	68.98									
11		2016	82.95									
12		2018	93.05									
13		2020	112.03									
14												

FIGURA 3.15. Tabla de datos en Excel. Los datos originales se insertan de forma manual.

La Fig. 3.15 muestra las fórmulas para definir los datos a partir de $x = 0$. Al insertar las fórmulas utilice la opción de arrastre (desde arriba hacia abajo) para los datos de las celdas inferiores.

Paso II: Diseñar la matriz para efectuar el cálculo de regresión exponencial.

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1												
2		Ajuste Exponencial	$y(x) = ae^{\beta x} \quad \text{con} \quad \beta = \frac{\sum x_i \ln y_i - \bar{\ln y} \sum x_i}{\sum x_i^2 - \bar{x} \sum x_i} \quad y \quad \alpha = e^{\bar{\ln y} - \beta \bar{x}}; \quad R^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$									
3												
4												
5		Cantidad de microplásticos en el Pacífico tropical oriental										
6		Año	$C_M (N/m^3)$									
7		2008	41.28									
8		2010	50.05									
9		2012	59.48									
10		2014	68.98									
11		2016	82.95									
12		2018	93.05									
13		2020	112.03									
14												
15												

FIGURA 3.16. Matriz de cálculo de regresión exponencial en Excel.

La Fig. 3.16 muestra las fórmulas para construir los cálculos de la regresión exponencial. Al insertar las fórmulas use la opción de arrastre (desde arriba hacia abajo) para los datos de las celdas inferiores.

Paso III: Cálculo de sumas, promedios y los parámetros α y β .

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
2	Ajuste Exponencial			$y(x) = \alpha e^{\beta x}$ con $\beta = \frac{\sum x_i \ln y_i - \overline{\ln y} \sum x_i}{\sum x_i^2 - \bar{x} \sum x_i}$ y $\alpha = e^{\overline{\ln y} - \beta \bar{x}}$; $R^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$									
3													
4													
5	Cantidad de microplásticos en el Pacífico tropical oriental		Datos (x = 0 -> 2008)			Matriz de cálculo de regresión							
6	Año	C_M (N/m ³)	n	x_i	y_i	$\ln y_i$	x_i^2	$x_i \ln y_i$	$(\ln y_i - \overline{\ln y})^2$	$(\ln y_i - \ln \alpha - \beta x_i)^2$			
7	2008	41.28	1	0	41.28	3.720	0	0.000					
8	2010	50.05	2	2	50.05	3.913	4	7.826					
9	2012	59.48	3	4	59.48	4.086	16	16.343					
10	2014	68.98	4	6	68.98	4.234	36	25.403					
11	2016	82.95	5	8	82.95	4.418	64	35.346					
12	2018	93.05	6	10	93.05	4.533	100	45.331					
13	2020	112.03	7	12	112.03	4.719	144	56.625					
14	=SUMA(F7:F13)		Σ	42	507.82	29.623	364	186.874					
15	=PROMEDIO(F7:F13)		\bar{x}	6.000	β	0.0816	=(J14-F17*F14)/(I14-F16*F14)						
16	=PROMEDIO(H7:H13)		$\overline{\ln y}$	4.232	α	42.2004	=EXP(F17-H16*F16)						
17													

FIGURA 3.17. Sumas y promedios en Excel.

La Fig. 3.17 muestra las fórmulas para calcular sumas y promedios. Al insertar la suma en la celda F14 se emplea la opción de arrastre para las celdas adyacentes. Por otro lado, se utiliza la fórmula promedio para los valores de x y $\ln y$. Por último, se insertan las fórmulas dada por los mínimos cuadrados para los parámetros de α y β .

Paso IV: Cálculo del coeficiente de determinación R^2

A B C D E F G H I J K L M N O														
2	Ajuste Exponencial		$y(x) = ae^{\beta x}$ con $\beta = \frac{\sum x_i \ln y_i - \bar{\ln y} \sum x_i}{\sum x_i^2 - \bar{x} \sum x_i}$ y $\alpha = e^{\bar{\ln y} - \beta \bar{x}}$; $R^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$											
5	Cantidad de microplásticos en el Pacífico tropical oriental		Datos (x = 0 -> 2008)			Matriz de cálculo de regresión								
6	Año	C_M (N/m ²)	n	x_i	y_i	$\ln y_i$	x_i^2	$x_i \ln y_i$	$(\ln y_i - \bar{\ln y})^2$	$(\ln y_i - \ln \alpha - \beta x_i)^2$				
7	2008	41.28	1	0	41.28	3.720	0	0.000	0.262	0.000				
8	2010	50.05	2	2	50.05	3.913	4	7.826	0.102	0.000				
9	2012	59.48	3	4	59.48	4.086	16	16.343	0.021	0.000				
10	2014	68.98	4	6	68.98	4.234	36	25.403	0.000	0.000				
11	2016	82.95	5	8	82.95	4.418	64	35.346	0.035	0.001				
12	2018	93.05	6	10	93.05	4.533	100	45.331	0.091	0.001				
13	2020	112.03	7	12	112.03	4.719	144	56.625	0.237	0.000				
14	=SUMA(K7:K13)		Σ	42	507.82	29.623	364	186.874	0.747	0.002				
15	=SUMA(L7:L13)		S_t	6.000	β	0.0816	S_r	0.747	R^2	0.997	=(J16-J17)/J16			
16			$\bar{\ln y}$	4.232	α	42.2004	S_e	0.002	R	0.999	=RAIZ(L16)			

FIGURA 3.18. Cálculo de coeficiente de determinación R^2 .

La Fig. 3.18 muestra las fórmulas para calcular la dispersión y los errores cuadráticos. Al insertar la fórmula para la desviación en la celda K7 y la fórmula para los errores cuadráticos en la celda L7 utilice la opción de arrastre para las celdas adyacentes. Nótese que los valores en las celdas K14 y L14 corresponden a la dispersión S_t y a la suma de los

errores cuadráticos S_r respectivamente. Posterior a ello y a manera de ilustrar, se etiquetan los valores S_t y S_r en las celdas J16 y J17. Por último, se insertan las fórmulas para el coeficiente de determinación en la celda L16 y la fórmula para el coeficiente de determinación en la celda L17.

Paso V: Hacer la gráfica de datos y la línea de tendencia de ajuste. La Fig. 3.19 muestra los datos y la línea de ajuste exponencial en Excel. Para verificar los resultados se seleccionan los datos y se inserta el gráfico de dispersión. Posteriormente se ubica el cursor sobre el gráfico y al dar clic derecho al mouse aparece un campo de opciones en donde uno de ellos corresponde al de agregar línea de tendencia. Se selecciona la línea de tendencia exponencial y se selecciona mostrar gráfico de la ecuación y valor de R cuadrado. Así pues, entre los puntos aparece la línea de tendencia y la función exponencial con el coeficiente de determinación que los representa. Si los valores de α, β y R^2 coinciden con los calculados el ajuste se realizó adecuadamente. Ahora bien, acorde a los resultados se tiene que la respuesta al literal a y b (el modelo exponencial y el coeficiente de determinación) vienen dada por

$$y(x) = 42.200e^{0.0816x}, \quad R^2 = 0.997$$

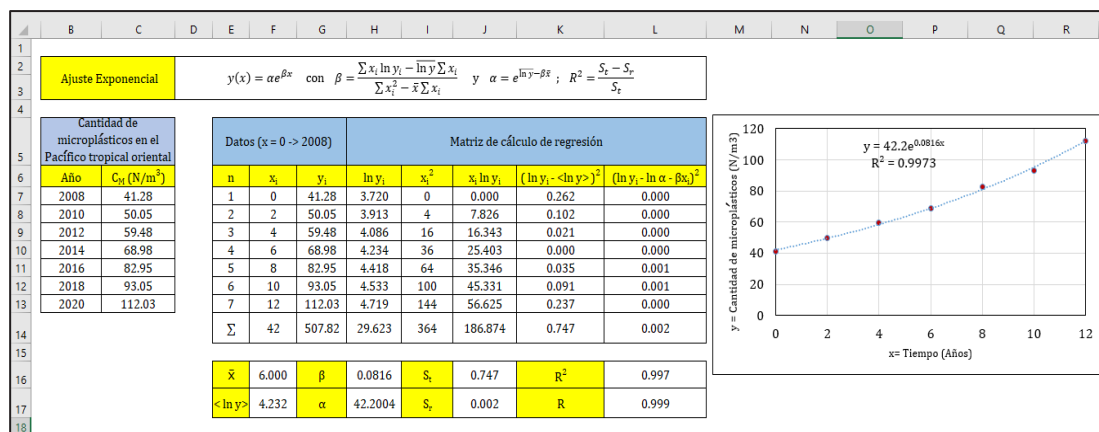


FIGURA 3.19. Modelo de regresión exponencial en hoja de cálculo Excel.

Los resultados indican que la cantidad de microplásticos por metros cúbicos en las costas de Galápagos se incrementan con una tendencia exponencial. El modelo explica el 99.73%

de la variabilidad de los datos. Dado que R^2 es un valor próximo a 1 el modelo exponencial proporciona un buen ajuste.

Para concluir es importante señalar que, aunque no se trabajaron con los datos reales se tiene que las investigaciones realizadas por OIEA (ver gráfico de la Fig. 3.14) indican que la contaminación por microplásticos en el océano Pacífico tropical oriental seguirá aumentando en los próximos años. Se estima que en 2030 la cantidad de microplásticos de la región será unas 3.9 veces superior a la de 2008. En 2050 se habrá duplicado y será 6.4 mayor que en 2008 y en 2100 será 10 veces mayor a la registrada a inicios del siglo a menos que se adopten medidas para cambiar la situación. Las predicciones son el resultado de modelos matemáticos realizado por la comunidad científica. Así pues, se refleja parte de la importancia de construir modelos matemáticos dado que los mismos proporcionan información a futuro sobre un evento o fenómeno en particular, esto permite tomar acciones en pro de la mejora de una determinada situación.

3.8 Ejercicios propuestos

Observación:

- Resolver cada uno de los ejercicios planteados haciendo uso de la hoja de cálculo Excel.
- Construir las matrices numéricas correspondientes a cada modelo.
- Representar gráficamente los datos.

1.- La siguiente tabla muestra la población (en millones) de Ecuador durante 2010-2020. (Fuente: Datosmacro.com)

Año	2009	2010	2011	2012	2013	2014
Población	14.738	15.012	15.266	15.521	15.775	16.027

Año	2015	2016	2017	2018	2019	2020
Población	16.279	16.529	16.777	17.023	17.268	17.511

- Encontrar un modelo lineal. En este modelo y representa la población y x el año, donde $x = 0$ corresponde a 2009.
- Determinar el coeficiente de determinación y la bondad del ajuste. Señale si es bueno el ajuste.
- Utilizar el modelo para estimar la población en el año 2030.
- Emplear el modelo para estimar la tasa de cambio de la población.



Personas en las calles de Quito. Según el programa de la Naciones Unidas para el medio ambiente uno de los problemas ambientales existentes y emergente es el crecimiento de la población. El 18 de julio del año 2022 a las 18 horas en Ecuador la población alcanzó la cantidad de 18 millones de habitantes dadas las cifras publicadas por el Instituto Ecuatoriano de Estadística y Censos (INEC). Un modelo matemático a partir de los datos de la población desde el año 1960 hasta 2021 indica que la tendencia de crecimiento se rige por una función cuadrática. Fotografía: Jonathan Machado (API).

2.- La población p de una comunidad pequeña en los suburbios de una ciudad crece con rapidez durante un periodo de 20 años tal y como muestra la siguiente tabla:

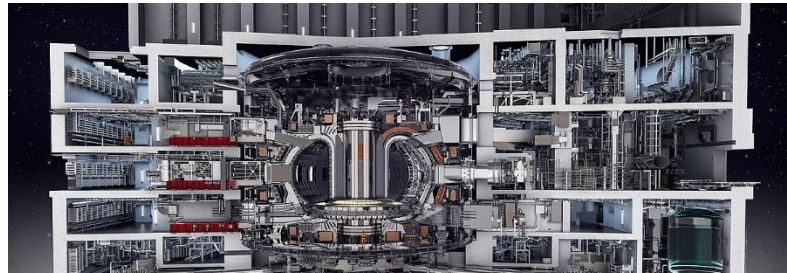
x	0	5	10	15	20
p	100	200	450	950	2000

Si usted es un ingeniero ambiental que trabaja para el ministerio de ambiente debe pronosticar la población que habrá dentro de 5 años a fin de anticipar la demanda de energía, el incremento de residuos y el consumo de agua, entre otras variables de interés en el campo.

- Emplear un modelo exponencial y lineal para efectuar dicha predicción. En este modelo y representa la población y x el tiempo en años.
- Calcular el coeficiente de determinación y la bondad del ajuste en cada modelo.
- Indicar cuál modelo tiene mejor ajuste.
- Utilizar la interpolación de Newton de orden 3 para estimar la población en el año que corresponde a $x = 12$ y comparar el valor predichos por los modelos.
- Investigar porque el crecimiento de la población es uno de los problemas ambientales existentes y emergentes en la actualidad.

3.-La siguiente tabla muestra la producción mundial de electricidad P_E (miles de millones) a partir de fuentes renovables, excluida la hidroeléctrica ($\text{kW}\cdot\text{h}$). La variable t representa el tiempo en años. (Fuente: Banco mundial).

Año	Producción de electricidad ($\text{kW}\cdot\text{h}$)
2000	217.09
2001	224.46
2002	253.26
2003	277.86
2004	316.18
2005	359.31
2006	405.33
2007	467.44
2008	543.40
2009	631.82
2010	765.44



Dibujo del tokamak ITER y los sistemas integrados de la planta. El ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor) es un megaproyecto científico que intenta generar los procesos de fusión nuclear que ocurren en el sol y las estrellas para producir grandes cantidades de energía que serviría para alimentar las necesidades eléctricas de la humanidad por millones de años. Algunos artículos científicos ya definen este proyecto como “la energía que cambiará el curso de la civilización” o “el mayor salto de la humanidad”. Comparada con las energías renovables, la fusión tiene todas las ventajas y ninguno de sus inconvenientes. La eólica, la solar y la hidráulica son limpias, pero no permanentes: la falta de viento, de luz solar o de agua les impide producir energía todas las horas del día todo el año. La energía de fusión sí lo haría. Fotografía: ITER Tokamak and Plant Systems (Crédito imagen Wikipedia).

- Encontrar un modelo cuadrático. En este modelo y representa la producción de electricidad y x el año, donde $x = 0$ corresponde al año 2000.
- Calcular el coeficiente de determinación y la bondad del ajuste. Señale si es bueno el ajuste.
- Utilizar el modelo para estimar la producción de electricidad en el año 2015. El valor reportado por el banco mundial para este año fue 1.64 billones ($\text{kW}\cdot\text{h}$) ¿Cómo se compara este valor con el predicho por el modelo?

4.- La siguiente tabla muestra las horas de sol en la ciudad de Miami durante el año a lo largo de los meses. (Data: 1999 - 2019: Horas de sol, Fuente: climate-data.org.)

Meses	Enero	Febrero	Marzo	Abril	Mayo	Junio
Horas de sol (h)	6.8	7.4	8.2	9.4	10.1	10.3

Meses	Julio	Agosto	Septiembre	Octubre	Noviembre	Diciembre
Horas de sol (h)	10.3	9.8	9.1	8.2	7.4	6.8

- Encontrar un modelo trigonométrico de la forma $y(x) = A + C \sin(\omega_0 x + \varphi)$. En este modelo y representa las horas de sol y x el tiempo en meses, donde $x = 1$ corresponde al mes de enero.
- Hallar el coeficiente de determinación. ¿Es bueno el ajuste?
- Utilizar el modelo para estimar las horas anuales promedios del sol en la ciudad. ¿Qué término del modelo se utilizó? y ¿Cuál es el periodo? Explicar la respuesta.
- Investigar la importancia del estudio de las horas de sol en la ingeniería ambiental.

5.- En la ingeniería ambiental, las reacciones enzimáticas se utilizan mucho para caracterizar reacciones mediadas biológicamente. A continuación, se dan expresiones de tasas propuestas para una reacción enzimática, donde $[S]$ es la concentración del sustrato y v_0 es la tasa inicial de la reacción.

$[S], M$	0.01	0.05	0.1	0.5
$v_0, 10^{-6} M/s$	6.3636×10^{-5}	7.9520×10^{-3}	6.3472×10^{-2}	6.0049

$[S], M$	1	5	10	50	100
$v_0, 10^{-6} M/s$	17.960	24.425	24.491	24.500	24.500

- Encontrar un modelo no lineal de la forma $v_0 = k[S]^3/(K + [S]^3)$ con $a_1 = 1/k$ y $a_2 = K/k$. Los coeficientes a_1 y a_2 son solución del sistema de ecuaciones:

$$a_1 n + a_2 \sum_{i=1}^n 1/[S_i]^3 = \sum_{i=1}^n 1/v_{0i}$$

$$a_1 \sum_{i=1}^n 1/[S_i]^3 + a_2 \sum_{i=1}^n 1/[S_i]^6 = \sum_{i=1}^n 1/(v_{0i}[S_i]^3)$$

que se obtienen de minimizar

$$S_r = \sum_{i=1}^n (v_{0i}^{-1} - a_1 - a_2[S_i]^{-3})^2.$$

- Hallar el coeficiente de determinación. ¿Es bueno el ajuste?

- c) Utilizar la interpolación de Newton de cuarto orden para estimar v_0 cuando $[S] = 8 M$. Comparar el valor obtenido con el predicho por el modelo.

6.- A mediados de los años 80 una especie invasora de hipopótamos conformada por un 1 macho y 3 hembras se introdujo en Colombia y a lo largo de los años su población se ha incrementado distribuyéndose a lo largo del río Magdalena. Esta invasión es denominada por los científicos una bomba de tiempo ecológica ya que representa un riesgo tanto para las comunidades locales como para los ecosistemas y las especies nativas. La siguiente tabla presenta las cronologías aproximadas de los hipopótamos en Colombia a partir del año 1981. (Fuente: Diario el Espectador):

Año	1981	2007	2011	2015	2021
Cantidad de hipopótamos	4	20	28	40	130

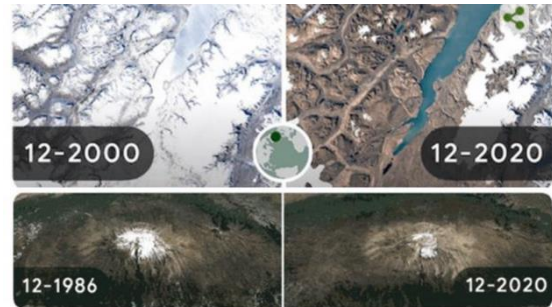
- a) Encontrar un modelo exponencial de la forma $y = \alpha 10^{\beta x}$. En este modelo y representa la cantidad de hipopótamos y x el tiempo en años, donde $x = 0$ corresponde al año 1981
- b) Hallar el coeficiente de determinación y la bondad del ajuste. ¿Es bueno el ajuste?
- c) Utilizar el modelo para estimar la población de hipopótamos en el año 2035.
- d) Investigar el impacto ambiental que se puede desencadenar si no se toman acciones para controlar la reproducción de los hipopótamos.



El 25 de marzo del año 2022 el ministerio de Ambiente y Desarrollo sostenible de Colombia oficializó a los hipopótamos como una especie exótica invasora en dicho país. El objetivo es avanzar en acciones que permitan controlar la expansión de la especie a lo largo del territorio. Los hipopótamos son considerados "ingenieros biológicos", lo que significa que debido a su gran tamaño y necesidades de alimentación son capaces de cambiar los ecosistemas donde se encuentran, lo cual perjudica directamente no solo a la fauna y flora acuática sino también al estilo de vida de las poblaciones humanas de su entorno. Fotografía: Agencia AFP.

7.-La siguiente tabla muestra el aumento del nivel del mar (mm) a lo largo de los años debido al deshielo de Groenlandia y la Antártida. (Fuente: Nature.).

Año	Aumento del nivel del mar (mm)
1995	0.8
1997	1.0
1999	1.7
2001	2.1
2003	2.9
2005	4.5
2007	6.6
2009	8.5
2011	11.4
2013	14.2
2015	16.9
2017	17.8



Dos de los grupos de imágenes que difunde Google en conmemoración al día de la tierra. El 22 de abril del año 2022 el Doodle de Google se suma a la lucha por el cambio climático en conmemoración al día internacional de la madre Tierra. El buscador más famoso de Internet destaca imágenes reales en lapso de tiempo de Google Earth y otras fuentes, que muestran los impactos del cambio climático en nuestro planeta tal y como lo es la desaparición de masas de hielo en glaciares y las zonas polares. Fotografía: Google.

- a) Encontrar un modelo polinómico de grado 3 (regresión cúbica) de la forma:

$$y = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0.$$

En este modelo y representa el aumento del nivel del mar y x el tiempo en años, donde $x = 0$ corresponde al año 1995.

Sugerencia: Los coeficientes a_3, a_2, a_1 y a_0 son solución de un sistema de 4 ecuaciones que se desprende al desarrollar Ec. 3.17 hasta $m = 3$.

- b) Hallar el coeficiente de determinación y la bondad del ajuste. ¿Es bueno el ajuste?
- c) Utilizar el modelo para estimar el aumento del nivel del mar para el año 2025.
- d) Utilizar la interpolación de Newton de orden 3 para estimar el aumento del nivel del mar en el año 2012 y comparar el valor obtenido con el presentado por la revista Nature que corresponde a 12.8mm.
- e) Investigar la relación de estos datos con el problema del cambio climático.

8.- El umbral de audición del oído a una frecuencia de 1000 Hz corresponde a 0 db. Una exposición prolongada a intensidades cercanas a 90 db puede causar un desplazamiento

temporal o permanente del umbral de audición (sordera) que puede alcanzar los 28db. Considerando lo anterior, un ingeniero ambiental mide con un sonómetro el nivel de intensidad del sonido (en decibelios) en un radio de 500 m del centro de una ciudad en horas punta. Los resultados que obtiene corresponden a los valores presentados en la siguiente tabla:

Radio (m)	10	50	100	150	200	250
Intensidad de sonido (db)	89.90	75.85	69.80	66.26	63.75	61.80

Radio (m)	300	350	400	450	500
Intensidad de sonido (db)	60.21	58.86	57.70	56.67	55.75

- Encontrar un modelo logarítmico de la forma $y = a + b \log_{10} x$. En este modelo y representa la intensidad de sonido y x la distancia en metros.
- Hallar el coeficiente de determinación. ¿Es bueno el ajuste?
- Utilizar el modelo para estimar a qué distancia el nivel de intensidad corresponde a 80 db
- Utilizar la interpolación de Newton de orden 4 para estimar la intensidad de sonido a un radio 175m.
- Investigar la importancia del estudio de la intensidad de sonido en la ingeniería ambiental.



Trafico en Bombay (India). La organización mundial de la salud define al ruido como todo sonido que supere los 65db. La ciudad de Bombay se encuentra entre las diez más ruidosas de mundo. El tráfico vehicular y la sobrepoblación dan lugar a ruidos de más de 100db. Si bien el ruido no se acumula o se mantiene en el tiempo como otros contaminantes, este puede deteriorar la calidad de vida de las personas si no se controla. Fotografía: EL confidencial (EFE)

9.-Tres organismos patógenos decaen de forma exponencial en aguas de un lago de acuerdo con el siguiente modelo:

$$p(x) = Ae^{-1.5x} + Be^{-0.3x} + Ce^{-0.05x}$$

donde x es el tiempo en horas. Estimar la población inicial de cada organismo (A, B y C), dadas las siguientes mediciones:

x (h)	0.5	1	2	3	4	5	6	7	9
$p(x)$	6.0	4.4	3.2	2.7	2.2	1.9	1.7	1.4	1.1

Sugerencia: Minimizar

$$S_r = \sum_{i=1}^n (p_i - Ae^{-1.5x_i} - Be^{-0.3x_i} - Ce^{-0.05x_i})^2$$

10.- El costo de una compañía C (en ciento de miles de \$) para eliminar $p\%$ de un químico de su agua residual se muestra en la siguiente tabla:

$p\%$	10	20	30	40	50	60	70	80	90
C	0.7	1	1.3	1.7	2.0	2.7	3.6	5.5	11.2

Un ajuste para los datos está dado por:

$$c(p) = \frac{ap}{(b+p)(c+p)}, \quad 0 \leq p < 100$$

a) Estimar los parámetros a, b y c .

Sugerencia: Reescribir el ajuste de la forma:

$$y^{-1} = a_0 + a_1x + a_2x^{-1}$$

y luego minimizar

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i^{-1} - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^{-1})^2$$

b) Obtener el coeficiente de determinación del ajuste. ¿Es bueno el ajuste?

- c) Usar el modelo para encontrar el costo medio necesario para eliminar entre el 75% y el 80% del químico.

3.9 Proyecto para grupo: Producto iónico del agua

Los ingenieros ambientales que estudian los efectos de la lluvia ácida deben determinar el valor del producto iónico del agua K_w como función de la temperatura. Los científicos sugieren la siguiente ecuación para modelar dicha relación

$$-\log_{10} K_w = \frac{a}{T} + b \log_{10} T + cT + d$$

siendo a, b, c y d constantes.

- a) Demostrar a partir de la minimización del cuadrado de los residuos haciendo $x = T$ y $y = K_w$ que la forma de obtener los coeficientes para construir el modelo (a partir de un conjunto de datos) se obtiene resolviendo el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} nd + c \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n \log_{10} x_i + a \sum_{i=1}^n x_i^{-1} &= \sum_{i=1}^n \log_{10} y_i \\ d \sum_{i=1}^n x_i + c \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i \log_{10} x_i + an &= \sum_{i=1}^n x_i \log_{10} y_i \\ d \sum_{i=1}^n \log_{10} x_i + c \sum_{i=1}^n x_i \log_{10} x_i + b \sum_{i=1}^n (\log_{10} x_i)^2 + a \sum_{i=1}^n x_i^{-1} \log_{10} x_i &= \sum_{i=1}^n \log_{10} x_i \log_{10} y_i \\ d \sum_{i=1}^n x_i^{-1} + cn + b \sum_{i=1}^n x_i^{-1} \log_{10} x_i + a \sum_{i=1}^n x_i^{-2} &= \sum_{i=1}^n x_i^{-1} \log_{10} y_i \end{aligned}$$

- b) Insertar la siguiente tabla que muestra el producto iónico K_w (moles/L) en función de la temperatura absoluta (K) (Fuente: Chapra y Canale) en una hoja de cálculo Excel.

K_w (moles/L)	273.15	283.15	293.15	303.15	313.15
T (K)	1.164x10 ⁻¹⁵	2.950x10 ⁻¹⁵	6.846x10 ⁻¹⁵	1.467x10 ⁻¹⁴	2.929x10 ⁻¹⁴

A partir de los datos diseñar una hoja cálculo que permita obtener cada una de las sumas y así formar (en la misma hoja) el sistema de ecuaciones 4x4.

- c) Resolver el sistema de ecuaciones en la hoja de cálculo Excel insertando el método de la matriz inversa.
- d) Indicar en las celdas cada una de las soluciones.
- e) Hallar el coeficiente de determinación y la bondad del ajuste. ¿Es bueno el modelo?
- f) Graficar la curva teórica junto con los puntos muestrales.
- g) Analizar los resultados acerca del comportamiento del producto iónico.
- h) Realizar una investigación resaltando la importancia del estudio del producto iónico en el campo de la ingeniería ambiental.

CAPÍTULO 4

INTEGRACIÓN Y DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

En este capítulo se presentan las fórmulas de integración y diferenciación numérica producto de aproximar una función $f(x)$ a un polinomio $p(x)$ de grado n .

4.1. Solución numérica de una integral definida.

4.2. Integración numérica: Fórmula de integración de Newton-Cotes.

4.3. Derivación numérica: Fórmula de Taylor y diferencias finitas divididas.

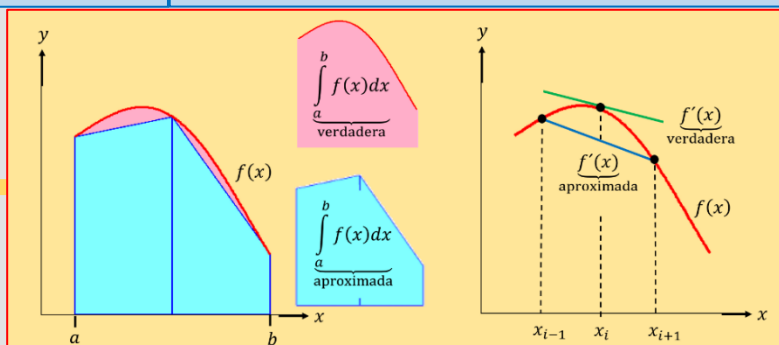
4.4. Ejercicio de aplicación: Cálculo de consumo de energía eléctrica en un horario nocturno.

4.5. Ejercicios propuestos.

4.6. Proyecto para grupo: Hidrogeometría de una corriente



Vista nocturna del condado de San Diego, Estados Unidos. El consumo global de electricidad (que había retrocedido un 0,7 % en 2020 por la crisis de la COVID-19) creció un 5,5 % en 2021, lo que se traduce en un 4,8 % más por encima de su nivel de 2019. Las grandes ciudades tienen un elevado consumo de energía eléctrica. En ingeniería ambiental se analizan estos tipos de datos con el propósito de estudiar su impacto en el medio ambiente. ¿Cómo podría usarse la integración numérica para calcular el consumo total de energía eléctrica en un horario nocturno en el condado de San Diego? (Vea sección 4.4). **Fotografía:** Wallhere



Integral definida aproximada por trapezios y una derivada en un punto, aproximada a partir de dos puntos.

4.1 Solución numérica de una integral definida

Sea una función $f(x)$ continua y no negativa en el intervalo cerrado $[a, b]$, tal y como muestra el gráfico de la Fig. 4.1. La región acotada por la gráfica de f , eje x y las rectas verticales $x = a$ y $x = b$ se le conoce como **área bajo la curva** [5,7]. En el lenguaje del cálculo, el área bajo la curva se determina mediante la siguiente integral definida:

$$A = \int_a^b f(x)dx. \quad (4.1)$$

Acorde a la estructura de la función $f(x)$, en un curso de cálculo integral se presenta que el cálculo de área bajo la curva puede proporcionar resultados **exactos** empleando las propiedades, los métodos o las técnicas de integración y el teorema fundamental del cálculo. En este sentido, en la Fig.4.2 se muestra la región y el procedimiento utilizado para hallar el área bajo la curva de la función $f(x) = xe^{-x}$ limitada por el eje x entre las rectas $x = 1/2$ y $x = 2$.

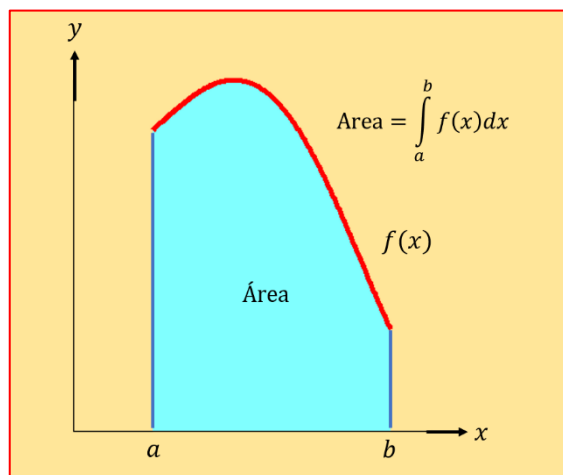


FIGURA 4.1. Área bajo la curva

Ahora bien, existen integrales donde el cálculo del área bajo la curva no es trivial y no se pueden obtener soluciones exactas. Es decir, no es posible hallar la

antiderivada F en términos de funciones elementales, tal que $F'(x) = f(x)$ a pesar de aplicar los métodos, propiedades, técnicas y teoremas antes mencionados. Algunas de estas integrales con soluciones no exactas tienen diversas aplicaciones en ciencias e ingeniería como por ejemplo las que se presentan en la Fig. 4.3.

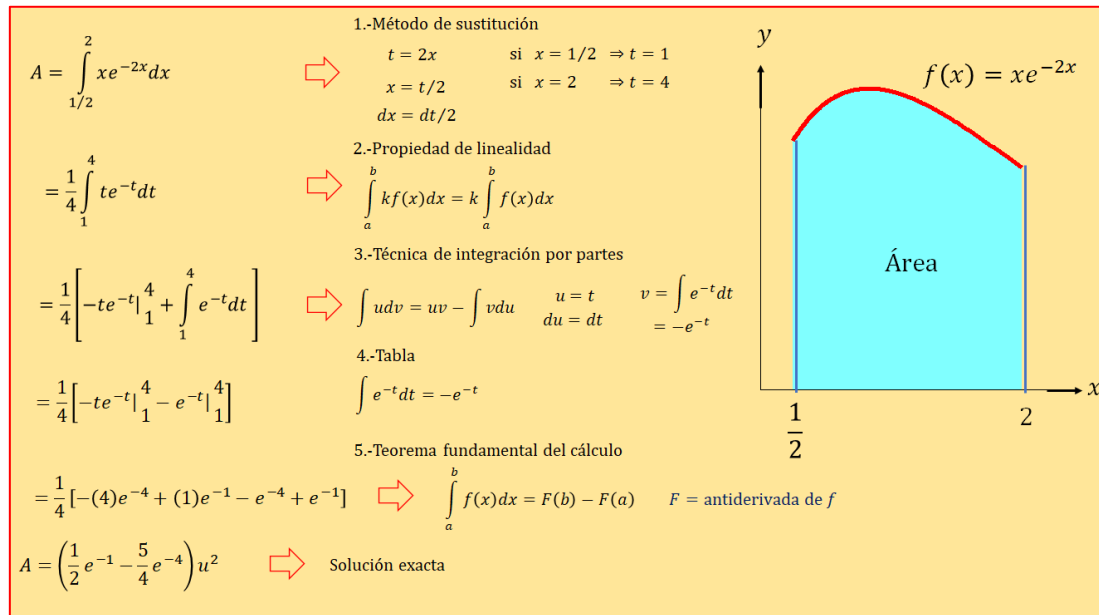


FIGURA 4.2. Desarrollo del cálculo de la integral definida.

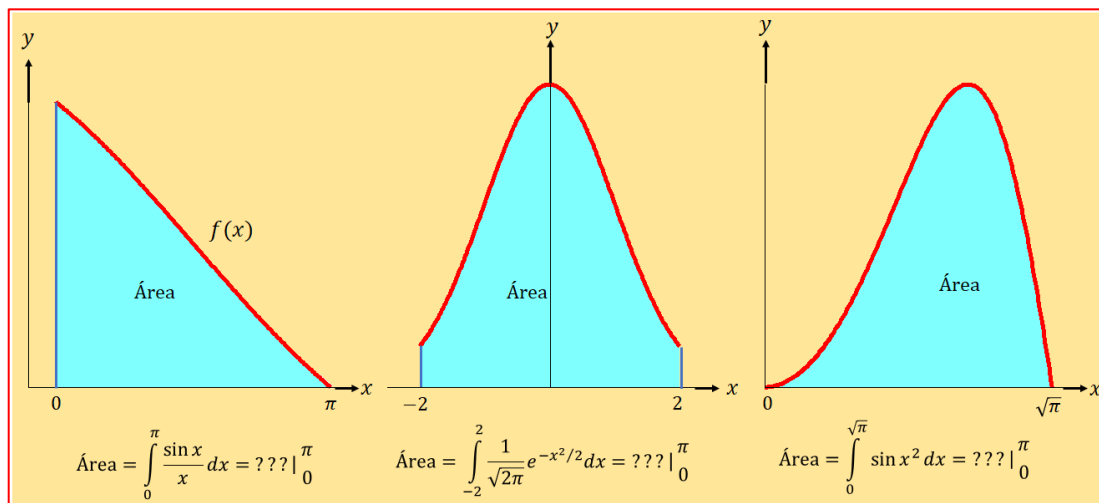


FIGURA 4.3. Integrales definidas que no admiten antiderivadas fundamentales.

Por consiguiente, para determinar el área bajo la curva de integrales definidas cuyo integrando no admite antiderivadas se debe recurrir a técnicas de aproximación

numéricas. Estas últimas tienen una gran ventaja dado que ofrecen un medio para calcular integrales definidas sin conocimiento de las reglas, propiedades, métodos y técnicas de integración y también permiten efectuar integración de funciones tabuladas como es el caso de datos experimentales.

4.2 Integración numérica: Fórmula de integración de Newton-Cotes

Las fórmulas de Newton-Cotes son un tipo de técnica de integración numérica más utilizada. Se basan en la estrategia de reemplazar una función complicada o datos tabulados por un polinomio de aproximación que es fácil de integrar:

$$A = \int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b f_n(x)dx \quad \text{con } f_n(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n \quad (4.2)$$

siendo n el grado del polinomio. Por ejemplo, en los gráficos de la Fig. 4.4 se utiliza un polinomio de grado cero (una línea recta horizontal) como una aproximación. A su vez se presenta la aplicación de un polinomio de primer grado y segundo grado (línea recta y parábola respectivamente) con el mismo propósito.

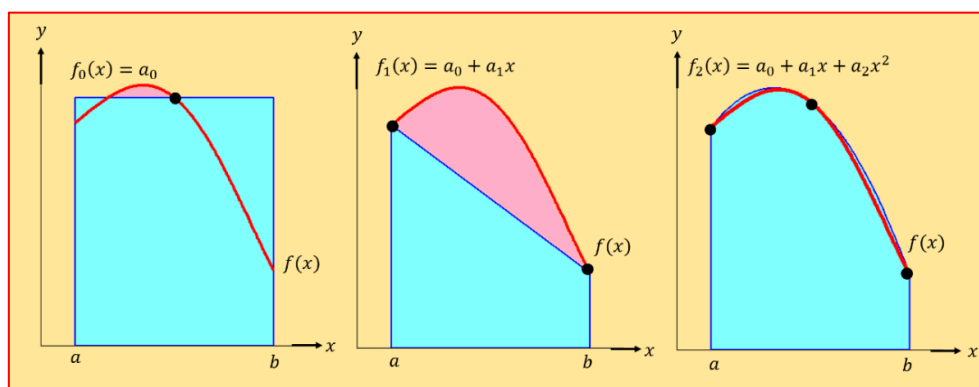


FIGURA 4.4. Aproximación de la integral mediante el área bajo la curva: Una línea horizontal, una línea recta y una parábola.

Nótese en los gráficos de la Fig. 4.4 que a medida que se incrementa el grado del polinomio se obtiene una mejor aproximación. También puede notarse que parte de

las regiones aproximadas no incluyen en su totalidad a la región real (ciertas regiones se muestran por exceso y otras por defecto). En consecuencia, para obtener una mejor aproximación (disminuyendo el exceso y defecto) la integral también se debe aproximar usando un conjunto de polinomios aplicados por pedazos a la función de los datos sobre segmentos de longitudes constantes. Por ejemplo, los gráficos de la Fig. 4.5 presentan dos, tres y cuatro segmentos de líneas para aproximar el área. El cálculo no solo se limita a líneas rectas sino también a todos los polinomios de grado n .

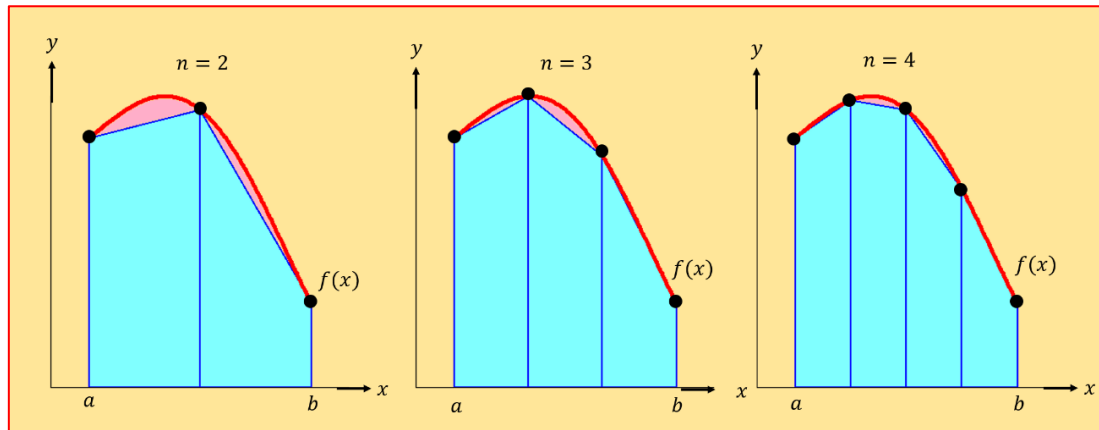


FIGURA 4.5. Aproximación de la integral mediante el área bajo la curva: dos, tres y cuatro.

Por último, se destaca que las fórmulas de Newton -Cotes a presentar son de tipo cerrada, es decir aquellas donde se conocen los datos al inicio y al final de los límites de integración.

4.2.1 Regla de punto medio

Sea f una función continua en el intervalo $[a, b]$. La regla de punto medio para aproximar el área bajo la curva representada por la integral definida está dada por:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^n f(\bar{x}_i) \quad (4.3)$$

con

$$\bar{x}_i = x_0 + (2i - 1) \frac{b - a}{2n}, \quad x_0 = a \quad \text{e} \quad i = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (4.4)$$

Esta regla es un caso particular de la fórmula de Newton-Cotes para casos donde el conjunto de polinomios de la forma de la Ec. 4.2 es de grado cero. Geométricamente el área bajo la curva puede aproximarse mediante una suma finita desde $i = 1$ hasta n rectángulos de igual base $\Delta x = (b - a)/n$ y altura $f(\bar{x}_i)$. La localización \bar{x}_i de cada punto medio se presenta en la Ec. 4.4 y se ilustra en los gráficos de la Fig. 4.6.

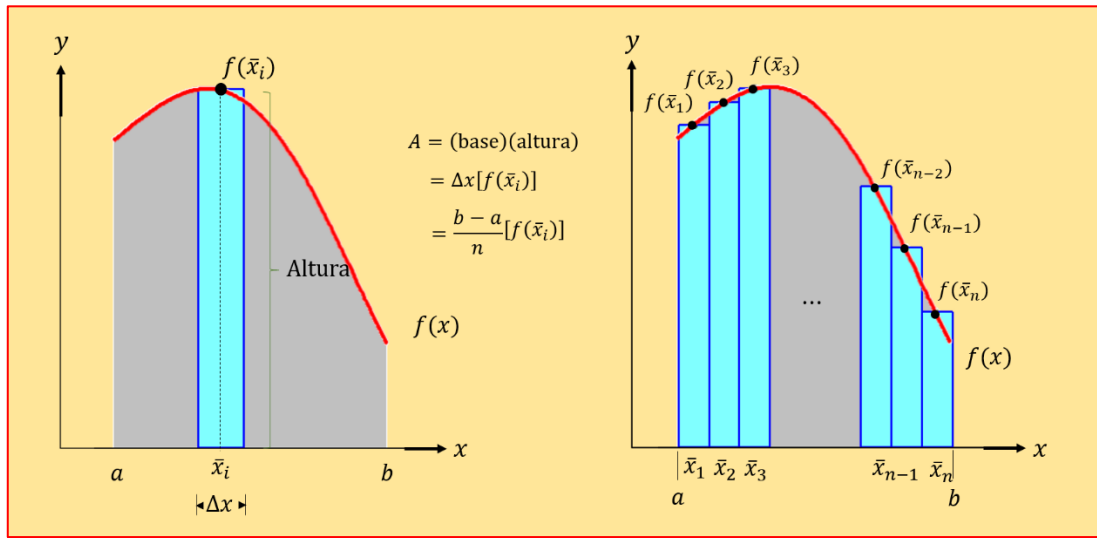


FIGURA 4.6. Geometría de la regla del punto medio.

Finalmente se tiene que el error porcentual aproximado $\varepsilon_{a\%}$ del cálculo de área bajo la curva empleando la regla de punto medio se obtiene mediante la siguiente fórmula:

$$\varepsilon_{a\%} = \frac{(b-a)^3}{24n^2} |\bar{f}''| 100\%, \quad a \leq x \leq b \quad (4.5)$$

Siendo \bar{f}'' el promedio o media de la segunda derivada en todo el intervalo. Es de resaltar que el cálculo de valores medios para funciones continuas se realiza por el **teorema de valor de medio**. Nótese que el error aproximado disminuye con el

cuadrado del número de rectángulos n . Por consiguiente, al incrementar n el error disminuye y por ende se tiene una mejor aproximación.

Ejemplo 4.1**Basurología**

La basurología es un concepto aplicado al estudio de los residuos generados por el ser humano. El “Proyecto basura” nace como disciplina académica en 1973 en la Universidad de Arizona (Stewart, 2008). Dicho proyecto informa que la cantidad de papel que se desecha en los hogares por semana tiene una distribución normal con media de 9.4 lb y desviación estándar de 4.2 lb. ¿Qué porcentaje de los hogares desecha por lo menos 10 lb de papel a la semana?

Paso I: Identificar el problema matemático. Dado que se presenta una distribución normal, esto es:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(x-\mu)^2/(2\sigma^2)}$$

Siendo $f(x)$ la función de densidad de probabilidad de una variable aleatoria X . La Fig. 4.7 presenta el gráfico de $f(x)$ con media $\mu = 9.4\text{lb} = (47/5)\text{lb}$ y $\sigma = 4.2\text{lb} = (21/5)\text{lb}$. Ahora bien, la probabilidad de que un hogar elegido al azar deseche más de 10lb de papel semanalmente es:

$$P(X \geq 10) = \int_{10}^{+\infty} \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(x-\frac{47}{5}\right)^2/882} dx$$

Para evitar la integral impropia y aproximarla a una integral definida, se aproxima mediante la integral de 10 a 25. (Es bastante seguro decir que muy pocos hogares desechan 25 lb o más de papel semanalmente dado el volumen que representa el mismo). Entonces:

$$P(X \geq 10) = \int_{10}^{25} \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(x-\frac{47}{5}\right)^2/882} dx$$

En resumen, el problema se reduce a determinar el área bajo la curva de la función de densidad de probabilidad en el intervalo cerrado $[10, 25]$. El integrando no tiene antiderivada elemental. Por consiguiente, para estimar la integral se emplea la **regla de punto medio** con $n = 6$.

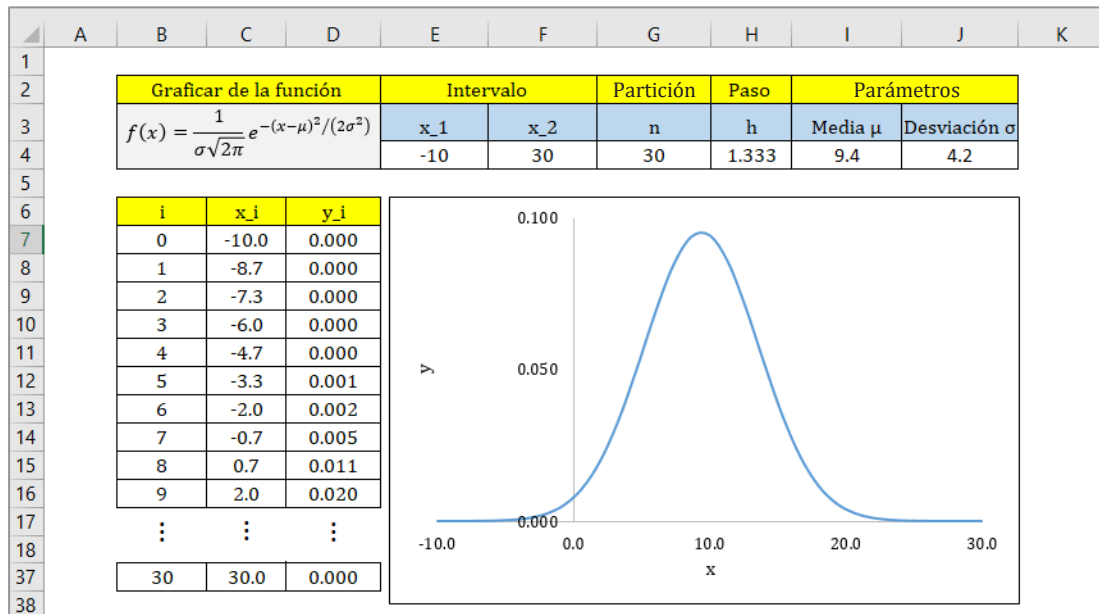


FIGURA 4.7. Gráfica de la Distribución normal con $\mu = (47/5)\text{lb}$ y $\sigma = (21/5)\text{lb}$ en una hoja de cálculo Excel.

Paso II: Localizar los puntos medios \bar{x}_i (Ec .4.4) y evaluar en f

$$i = 1 \Rightarrow \bar{x}_1 = 10 + [2(1) - 1] \frac{25 - 10}{2(6)} \Rightarrow f(\bar{x}_1 = 11.25) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(11.25 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0862$$

$$i = 2 \Rightarrow \bar{x}_2 = 10 + [2(2) - 1] \frac{25 - 10}{2(6)} \Rightarrow f(\bar{x}_2 = 13.75) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(13.75 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0556$$

$$i = 3 \Rightarrow \bar{x}_3 = 10 + [2(3) - 1] \frac{25 - 10}{2(6)} \Rightarrow f(\bar{x}_3 = 16.25) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(16.25 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0251$$

$$i = 4 \Rightarrow \bar{x}_4 = 10 + [2(4) - 1] \frac{25 - 10}{2(6)} \Rightarrow f(\bar{x}_4 = 18.75) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(18.75 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0080$$

$$i = 5 \Rightarrow \bar{x}_5 = 10 + [2(5) - 1] \frac{25 - 10}{2(6)} \Rightarrow f(\bar{x}_5 = 21.25) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(21.25 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0018$$

$$i = 6 \Rightarrow \bar{x}_6 = 10 + [2(6) - 1] \frac{25 - 10}{2(6)} \Rightarrow f(\bar{x}_6 = 23.75) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(23.75 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0003$$

Paso III: Hacer una gráfica de los rectángulos a partir de los valores de \bar{x}_i y $f(\bar{x}_i)$. La Fig.4.8 muestra la aproximación del área por rectángulos en una hoja de cálculo Excel.

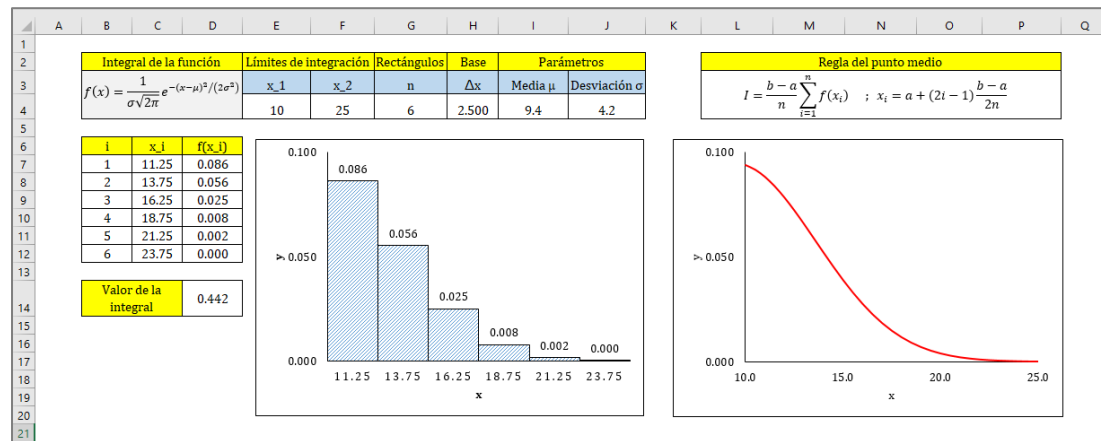


FIGURA 4.8. Cálculo de área empleando la regla de punto medio con $n = 6$ en una hoja de cálculo Excel.

Paso IV: Emplear la regla del punto medio Ec. 4.3

$$\int_{10}^{25} \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(x - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} dx = \frac{25 - 10}{6} \sum_{i=1}^6 \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(\bar{x}_i - \frac{47}{5}\right)^2 / 882}$$

$$= \frac{5}{2} \left[\frac{0.0862}{f(\bar{x}_1)} + \frac{0.0556}{f(\bar{x}_2)} + \frac{0.0251}{f(\bar{x}_3)} + \frac{0.0080}{f(\bar{x}_4)} + \frac{0.0018}{f(\bar{x}_5)} + \frac{0.0003}{f(\bar{x}_6)} \right]$$

$$= 0.4423$$

Por lo tanto, cerca del 44.23% de los hogares desecha semanalmente más de 10 lb de papel.

Paso V: Calcular el error aproximado (Ec. 4.5). La integral definida de f'' en $[10, 25]$ es:

$$\bar{f}'' = \frac{1}{25-10} \int_{10}^{25} \frac{125(25x^2 - 470x + 1768)}{4084101\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(x-\frac{47}{5}\right)^2/882} dx = 0.0002$$

Así

$$\varepsilon_{a\%} = \frac{(25-10)^3}{24(6)^2} |0.0002| 100\% = 0.08\%$$

A pesar que el resultado tiene un error aproximado pequeño, este puede mejorar incrementando el número de rectángulos.

4.2.2 Regla de los trapecios

Sea f una función en el intervalo $[a, b]$. La regla del trapecio para aproximar el área bajo la curva representada por la integral definida está dada por:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2n} \left[f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right] \quad (4.6)$$

donde la localización de los puntos x_i se calcula como:

$$x_i = x_0 + \left(\frac{b-a}{n} \right) i \quad \text{con } i = 0, 1, 2, 3, \dots, n \text{ y } x_0 = a \quad (4.7)$$

Esta regla es un caso particular de la fórmula de Newton-Cotes para casos donde el conjunto de polinomios de la forma de Ec. 4.2 es de grado uno. Geométricamente el área bajo la curva puede aproximarse mediante una suma finita desde $i = 1$ hasta n trapecios de igual base $\Delta x = (b-a)/n$ y altura promedio $[f(x_{i-1}) + f(x_i)]/2$ tal y como se muestra en los gráficos de la Fig. 4.9.

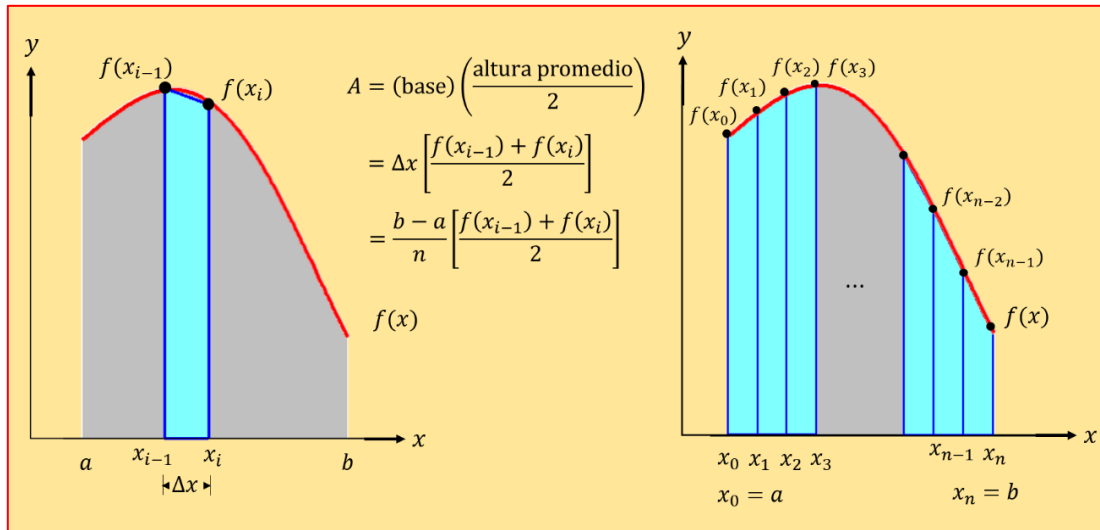


FIGURA 4.9. Geometría de la regla del trapecio.

Por último, se tiene que el error porcentual aproximado $\varepsilon_{a\%}$ del cálculo de área bajo la curva empleando la regla del trapecio se obtiene mediante la siguiente fórmula:

$$\varepsilon_{a\%} = \frac{(b-a)^3}{12n^2} |\bar{f}''| 100\%, \quad a \leq x \leq b \quad (4.8)$$

Nótese que el error disminuye con el cuadrado del número de trapecios. En consecuencia, a medida que se incrementa el número de trapecios n se tiene una mejor aproximación.

Ejemplo 4.2

Basurología

Aproximar el área bajo la curva de la función de densidad de probabilidad del ejemplo anterior empleando la regla del trapecio con $n = 6$.

Paso I: El problema matemático. Calcular

$$P(X \geq 10) = \int_{10}^{25} \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(x-\frac{47}{5}\right)^2/882} dx, \quad 10 \leq x \leq 25$$

Paso II: Localización de los puntos x_i (Ec .4.7) y evaluar en f

$$i = 0 \Rightarrow x_0 = 10 + \frac{(25 - 10)}{6}(0) \Rightarrow f(x_0 = 10.00) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(10.00 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0940$$

$$i = 1 \Rightarrow x_1 = 10 + \frac{(25 - 10)}{6}(1) \Rightarrow f(x_1 = 12.50) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(12.50 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0723$$

$$i = 2 \Rightarrow x_2 = 10 + \frac{(25 - 10)}{6}(2) \Rightarrow f(x_2 = 15.00) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(15.00 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0391$$

$$i = 3 \Rightarrow x_3 = 10 + \frac{(25 - 10)}{6}(3) \Rightarrow f(x_3 = 17.50) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(17.50 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0148$$

$$i = 4 \Rightarrow x_4 = 10 + \frac{(25 - 10)}{6}(4) \Rightarrow f(x_4 = 20.00) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(20.00 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0039$$

$$i = 5 \Rightarrow x_5 = 10 + \frac{(25 - 10)}{6}(5) \Rightarrow f(x_5 = 22.50) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(22.50 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0007$$

$$i = 6 \Rightarrow x_6 = 10 + \frac{(25 - 10)}{6}(6) \Rightarrow f(x_6 = 25.00) = \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(25.00 - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} = 0.0001$$

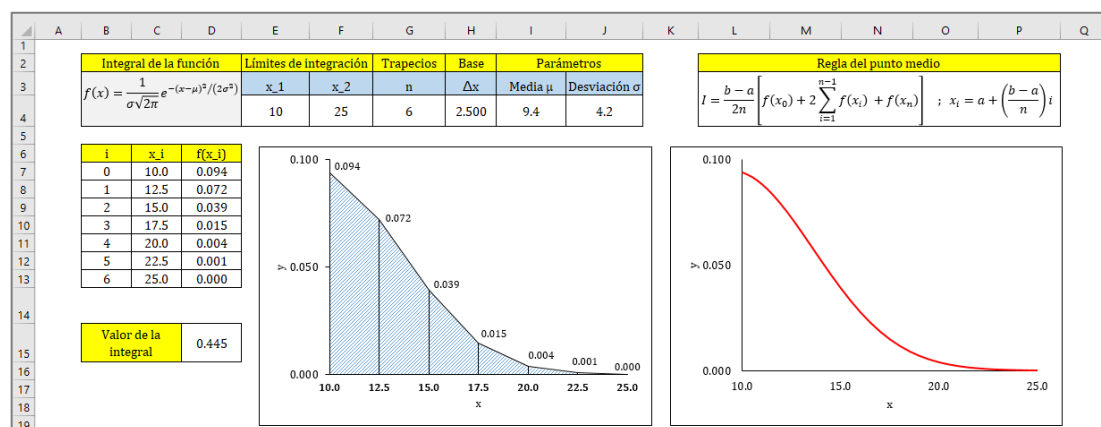


FIGURA 4.10. Cálculo de área empleando la regla del trapecio con $n = 6$ en una hoja de cálculo Excel.

Paso III: Hacer una gráfica de los trapecios a partir de los valores de x_i y $f(x_i)$. La Fig.4.10 muestra la aproximación del área por trapecios en una hoja de cálculo Excel.

Paso IV: Emplear la regla del trapecio Ec. 4.6

$$\begin{aligned} \int_{10}^{25} \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(x-\frac{47}{5}\right)^2/882} dx &= \frac{25-10}{(2)(6)} \left[\underbrace{\frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(10.00-\frac{47}{5}\right)^2/882}}_{f(x_0=10)} + \right. \\ &\quad \left. 2 \sum_{i=1}^{6-1} \underbrace{\frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(x_i-\frac{47}{5}\right)^2/882}}_{f(x_i)} + \underbrace{\frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(25-\frac{47}{5}\right)^2/882}}_{f(x_6=25)} \right] \\ &= \frac{5}{4} \left[\underbrace{0.0940}_{f(10)} + 2 \left(\underbrace{0.0723}_{f(12.5)} + \underbrace{0.0391}_{f(15)} + \underbrace{0.0148}_{f(17.5)} + \underbrace{0.0039}_{f(20)} + \underbrace{0.0007}_{f(22.5)} \right) \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{0.0001}_{f(25)} \right] \\ \int_{10}^{25} \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(x-\frac{47}{5}\right)^2/882} dx &= 0.4448 \end{aligned}$$

Integrando numéricamente con la regla del trapecio se concluye que cerca del 44.48% de los hogares desecha semanalmente más de 10 lb de papel.

Paso V: Calcular el error aproximado (Ec. 4.8). La integral definida de f'' en $[10, 25]$ es

$$\bar{f}'' = \frac{1}{25-10} \int_{10}^{25} \frac{125(25x^2 - 470x + 1768)}{4084101\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(x-\frac{47}{5}\right)^2/882} dx = 0.0002$$

Así

$$\varepsilon_{a\%} = \frac{(25-10)^3}{12(6)^2} |0.0002| 100\% = 0.161\%$$

A pesar que el resultado tiene un error aproximado pequeño, este puede mejorar incrementando el número de trapecios.

4.2.3 Regla Simpson 1/3

Sea f una función continua en el intervalo $[a, b]$ y sea n un número par. La regla Simpson para aproximar el área bajo la curva representada por la integral definida está dada por:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{3n} \left[f(x_0) + 4 \sum_{i=1,3,5}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{i=2,4,6}^{n-2} f(x_i) + f(x_n) \right] \quad (4.9)$$

donde la localización de los puntos x_i se calcula con la Ec. 4.6. Esta regla es un caso particular de la fórmula de Newton-Cotes para casos donde el conjunto de polinomios de la forma de Ec. 4.2 es de grado dos. La descripción gráfica de la regla de Simpson 1/3 consiste en aproximar las áreas bajo la curva por áreas formadas de arcos parabólicos y el eje x , unido por tres puntos tal y como se muestra en los gráficos de la Fig. 4.10. Nótese que el método se puede emplear sólo si el número de segmentos es par dado que los subintervalos se agrupan en pares tales que:

$$a = x_0 < \underbrace{x_1 < x_2}_{[x_0, x_2]} < \underbrace{x_3 < x_4}_{[x_2, x_4]} < \cdots < \underbrace{x_{n-2} < x_{n-1}}_{[x_{n-2}, x_n]} < x_n = b \quad (4.10)$$

Para finalizar, se tiene que error porcentual aproximado $\varepsilon_{a\%}$ del cálculo de área bajo la curva empleando la regla del Simpson puede obtenerse mediante la siguiente fórmula:

$$\varepsilon_{a\%} = \frac{(b-a)^5}{180n^4} |\bar{f}^{(4)}| 100\%, \quad a \leq x \leq b. \quad (4.11)$$

Dado que el error disminuye con la cuarta potencia del número de particiones n , se tiene que la regla Simpson 1/3 proporciona resultados más precisos. Sin embargo, requiere del conocimiento del promedio de la cuarta derivada, tarea que puede ser

tediosa dependiendo de la estructura funcional del integrando. Además, está limitada a situaciones en las que se presenta un número impar de segmentos, para este último caso se dispone de la regla Simpson 3/8 (ver Ap. C).

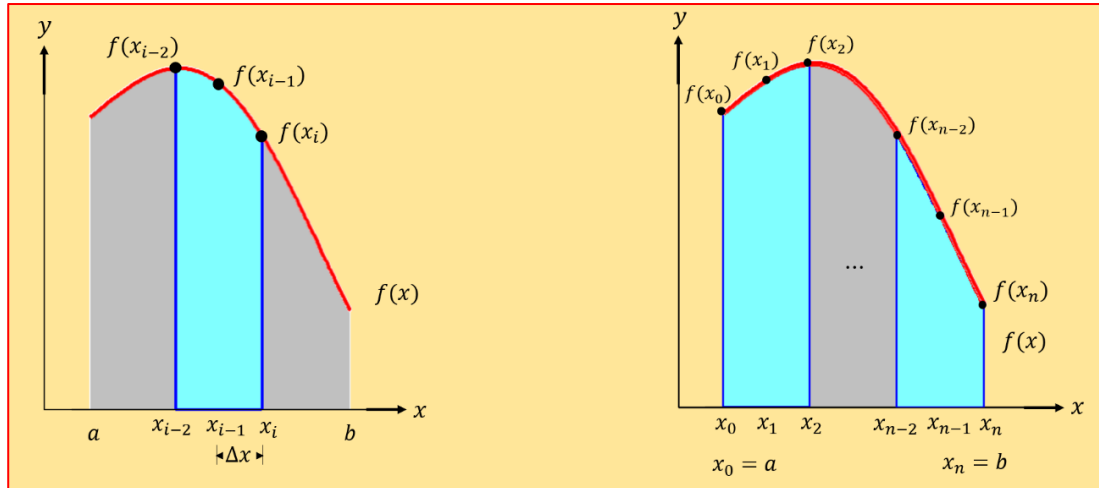


FIGURA 4.11. Descripción gráfica de la Regla de Simpson 1/3.

Ejemplo 4.3

Basurología

Aproximar el área bajo la curva de la función de densidad de probabilidad del ejemplo anterior empleando la regla Simpson 1/3 con $n = 6$

Paso I: El problema matemático. Calcular

$$P(X \geq 10) = \int_{10}^{25} \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25\left(x - \frac{47}{5}\right)^2 / 882} dx, \quad 10 \leq x \leq 25$$

Paso II: Localización de los puntos x_i (Ec .4.7) y evaluar en f . Del ejemplo anterior

$$i = 0 \Rightarrow x_0 = 10.00 \Rightarrow f(x_0 = 10.00) = 0.0940$$

$$i = 1 \Rightarrow x_1 = 12.50 \Rightarrow f(x_1 = 12.50) = 0.0723$$

$$i = 2 \Rightarrow x_2 = 15.00 \Rightarrow f(x_2 = 15.00) = 0.0391$$

$$i = 3 \Rightarrow x_3 = 17.50 \Rightarrow f(x_3 = 17.50) = 0.0148$$

$$i = 4 \Rightarrow x_4 = 20.00 \Rightarrow f(x_4 = 20.00) = 0.0039$$

$$i = 5 \Rightarrow x_5 = 22.50 \Rightarrow f(x_5 = 22.50) = 0.0007$$

$$i = 6 \Rightarrow x_6 = 25.00 \Rightarrow f(x_6 = 25.00) = 0.0001$$

Paso III: Hacer una gráfica de los segmentos parabólicos a partir de los valores de x_i y $f(x_i)$. La Fig.4.12 muestra los arcos parabólicos en una hoja de cálculo Excel.

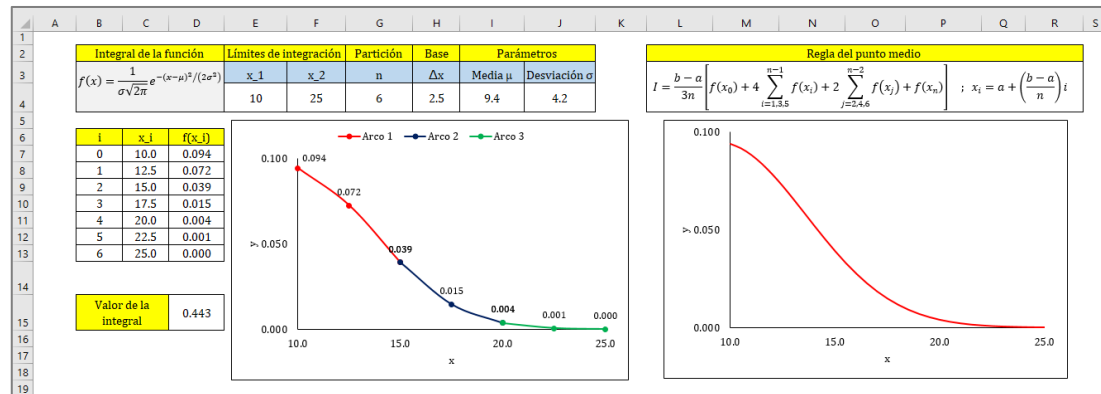


FIGURA 4.12. Cálculo de área empleando la regla de Simpson 1/3 con $n = 6$.

Paso IV: Emplear la regla Simpson la (Ec. 4.9):

$$\begin{aligned} \int_{10}^{25} \frac{5}{21\sqrt{2\pi}} e^{-25(x-\frac{47}{5})^2/882} dx &= \frac{25-10}{(3)(6)} \left[\frac{0.0940}{f(x_0)} + 4 \left(\frac{0.0723}{f(x_1)} + \frac{0.0148}{f(x_3)} + \frac{0.0723}{f(x_5)} \right) + \right. \\ &\quad \left. 2 \left(\frac{0.0391}{f(x_2)} + \frac{0.0039}{f(x_4)} \right) + \frac{0.0001}{f(x_6)} \right] \\ &= 0.4429 \end{aligned}$$

Al Integrar numéricamente con la regla de Simpson se concluye que cerca del 44.29% de los hogares desecha semanalmente más de 10 lb de papel.

Paso V: Calcular el error aproximado (Ec. 4.11). La integral definida de $\bar{f}^{(4)}$ en $[10, 25]$ es:

$$\bar{f}^{(4)} = \frac{1}{25 - 10} \int_{10}^{25} \frac{31250 (125x^4 - 4700x^3 + 53040x^2 - 166568x - 76378)}{1588560093162\sqrt{2\pi}} e^{-25(x-\frac{47}{5})^2/882} dx = -0.00003$$

Así

$$\varepsilon_{a\%} = \frac{(25 - 10)^5}{180(6)^4} |-0.00003| 100\% = 0.013\%$$

Acorde a los resultados se tiene que la regla Simpson 1/3 proporciona una mejor aproximación y requiere menos cantidad de particiones en el cálculo al compararlos con la regla de trapecio y de punto medio respectivamente. En efecto se tiene que cerca del 44.29% de los hogares desechan semanalmente más de 10 lb de papel con un margen de error aproximado de 0.013%. Los ingenieros ambientales aprovechan estos resultados para generar planes de reciclaje y consumo en la población.

4.3 Derivación numérica: Fórmula de Taylor y diferencias finitas divididas

Sea una función f y sus primeras $n + 1$ derivadas continuas en un intervalo que contiene a y x , entonces el valor de la función en x este dado por:

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2!}(x - a)^2 + \dots + \frac{f^n(a)}{n!}(x - a)^n + R_n \quad (4.12)$$

donde R_n es el residuo

$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n + 1)!} (x - a)^{n+1} \quad (4.13)$$

En la literatura la Ec. 4.12 se le conoce como **serie de Taylor o fórmula de Taylor** y a la Ec.4.13 como la **forma de Lagrange** del residuo, con ξ equivalente a un valor

de x en el intervalo $x - a$ mediante el cual la función toma un valor promedio. Si se omite el residuo, el lado derecho de la Ec. 4.11 es la aproximación del polinomio de Taylor para $f(x)$. En términos generales la fórmula de Taylor establece que cualquier función suave puede aproximarse mediante un polinomio (Chapra y Canale, 2007).

Ahora bien, en el cálculo numérico la serie de Taylor proporciona un medio para estimar el valor de las derivadas de una función en un punto x_i dado (según el caso del orden de la derivada a aproximar) un punto o varios. En el caso particular dado un punto posterior a x_i es decir x_{i+1} se puede expandir la serie de Taylor del siguiente modo:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \dots + \frac{f^n(x_i)}{n!}h^n + R_n. \quad (4.14)$$

Ahora truncando la serie después del primer término con la primera derivada y despejando $f'(x_i)$ se obtiene:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} + O(x_{i+1} - x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h) \quad (4.15)$$

donde (el error es $O(h)$) a $f(x_{i+1}) - f(x_i)$ se le conoce como la primera diferencia hacia adelante y a $h = x_{i+1} - x_i$ se le llama el tamaño del paso o incremento, esto es, la longitud del intervalo sobre el cual se realiza la aproximación. Se llama **diferencia hacia adelante** porque usa los datos en i e $i + 1$ para estimar la derivada. Así a partir de la fórmula de Taylor, la fórmula para estimar el valor de las derivadas de una función en un punto x_i de **diferencia a hacia atrás** dado un punto anterior x_{i-1} es:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + O(h) \quad (4.16)$$

Por último, la fórmula para estimar el valor de las derivadas de una función en un punto x_i de **diferencia centrada** dado x_{i-1} y x_{i+1} está dada por:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h} + O(h^2) \quad (4.17)$$

La Fig. 4.13 muestra la representación gráfica de la aproximación de primer orden hacia adelante, hacia atrás y centrada respectivamente.

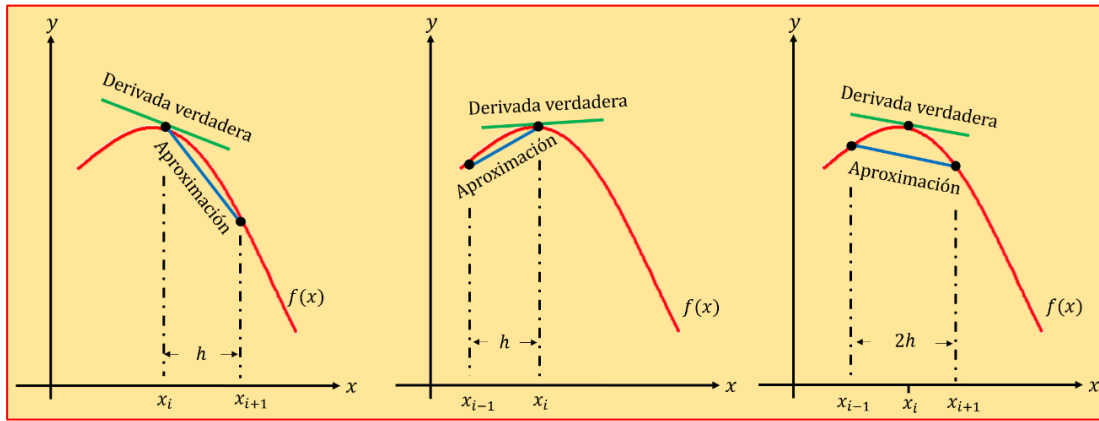


FIGURA 4.13. Gráficas de aproximaciones con diferencias finitas de la primera derivada: hacia adelante, hacia atrás y centrada.

Finalmente, para la determinación de los errores de truncamiento se emplea la fórmula de Lagrange para los residuos donde el término residual de la Ec. 4.14 es ahora:

$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} h^{n+1} = O(h^{n+1}) \quad (4.18)$$

siendo el subíndice n el que indica que este es el residuo en la aproximación de n –ésimo orden y ξ es un valor de x que se encuentra en algún punto entre x_i y x_{i+1} . El valor de ξ es de gran importancia porque proporciona una estimación exacta del error. Por otro lado, la nomenclatura $O(h^{n+1})$ significa que el error de truncamiento es de orden h^{n+1} , es decir, el error es proporcional al incremento h a la $(n+1)$ ésima

potencia. Nótese que se obtiene una mejor aproximación de las derivadas cuando $h \rightarrow 0$ esto es cuando x_{i+1} o x_{i-1} son próximos a x_i .

4.3.1 Fórmulas de diferenciación de orden superior hacia adelante, hacia atrás y centrada

Lo que sigue es un resumen de las fórmulas de diferenciación que se pueden obtener a partir del desarrollo en series de Taylor. Se presentan dos versiones para cada derivada siendo la última versión más exacta porque emplea un mayor número de términos en la expansión.

- Diferencias finitas de primer, segundo y tercer orden hacia adelante

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h) \quad (4.19)$$

$$f'(x_i) = \frac{4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}) - 3f(x_i)}{2h} + O(h^2) \quad (4.20)$$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} + O(h) \quad (4.21)$$

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 4f(x_{i+2}) - 5f(x_{i+1}) + 2f(x_i)}{h^2} + O(h^2) \quad (4.22)$$

$$f'''(x_i) = \frac{f(x_{i+3}) - 3f(x_{i+2}) + 3f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h^3} + O(h) \quad (4.23)$$

$$f'''(x_i) = \frac{-3f(x_{i+4}) + 14f(x_{i+3}) - 24f(x_{i+2}) + 18f(x_{i+1}) - 5f(x_i)}{2h^3} + O(h^2) \quad (4.24)$$

- Diferencias finitas de primer, segundo y tercer orden hacia atrás.

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + O(h) \quad (4.25)$$

$$f'(x_i) = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{2h} + O(h^2) \quad (4.26)$$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{h^2} + O(h) \quad (4.27)$$

$$f'''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3}))}{h^2} + O(h^2) \quad (4.28)$$

$$f''''(x_i) = \frac{f(x_i) - 3f(x_{i-1}) + 3f(x_{i-2}) - f(x_{i-3}))}{h^3} + O(h) \quad (4.29)$$

$$f''''(x_i) = \frac{5f(x_i) - 18f(x_{i-1}) + 24f(x_{i-2}) - 14f(x_{i-3}) + 3f(x_{i-4}))}{2h^3} + O(h^2) \quad (4.30)$$

- Diferencias finitas de primer, segundo y tercer orden centradas.

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h} + O(h^2) \quad (4.31)$$

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{12h} + O(h^4) \quad (4.32)$$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2} + O(h^2) \quad (4.33)$$

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 16f(x_{i+1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i-1}) - f(x_{i-2}))}{12h^2} + O(h^4) \quad (4.34)$$

$$f'''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + 2f(x_{i-1}) - f(x_{i-2}))}{2h^3} + O(h^2) \quad (4.35)$$

$$f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 8f(x_{i+2}) - 13f(x_{i+1}) + 13f(x_{i-1}) - 8f(x_{i-2}) + f(x_{i-3}))}{8h^3} + O(h^4) \quad (4.36)$$

Al comparar las fórmulas anteriores se concluye que la mejor aproximación la proporciona la diferencia centrada porque el error de truncamiento es de orden superior.

Ejemplo 4.4**Concentración de un contaminante en el fondo de un lago.**

La primera Ley de difusión de Fick establece que:

$$\text{Flujo de masa} = -D \frac{dc}{dx}$$

donde el flujo de masa = cantidad de masa que pasa a través de una unidad de área por tiempo ($\text{g}/\text{cm}^2 \text{ s}$), D = coeficiente de difusión (cm^2/s), c = concentración, y x = distancia (cm). Un ingeniero ambiental mide la concentración de un contaminante de los sedimentos en el fondo de un lago ($x = 0$ en la interfase sedimento-agua y aumenta hacia abajo) tal y como se presenta a continuación

$x(\text{cm})$	0	1	2	3
$c(10^6 \text{ g}/\text{cm}^3)$	0.06	0.32	0.5	0.6

Utilice la mejor técnica de derivación disponible para estimar la derivada en $x = 0$. Emplee esta estimación junto con la Ley de Fick para calcular el flujo de masa contaminante que desprende de los sedimentos hacia las aguas superiores ($D = 1.52 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$). Para un lago con $3.6 \times 10^6 \text{ m}^2$ de sedimento ¿Cuánto contaminante será transportado hacia el lago durante un año?

Paso I: Redefinir las variables, esto es $x = x$ y $y = f(x) = c$ y hacer una gráfica de los datos

x	0	1.5	3
y	0.06	0.42	0.6

Nótese que $h = 1.5$

Paso II: Calcular la derivada en $x = 0$. Dada la ubicación del punto, la técnica apropiada es la derivación hacia delante de primer orden presentada en la Ec. 4.25. Así

$$\begin{aligned} x_i &= 0 & f(x_i) &= 0.06 \\ x_{i+1} &= 1.5 & f(x_{i+1}) &= 0.42 \\ x_{i+2} &= 3 & f(x_{i+2}) &= 0.6 \end{aligned}$$

reemplazando en la Ec. 4.25 se tiene una aproximación para la derivada de $O(h^2)$

$$f'(x_i) = \frac{4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}) - 3f(x_i)}{2h} = \frac{4(0.42) - 0.6 - 3(0.06)}{2(1.5)} = 0.3$$

$$\therefore f'(x = 0) = 0.3$$

En efecto se tiene que $c'(x = 0) = 3 \times 10^{-7} \text{ gr/cm}^4$

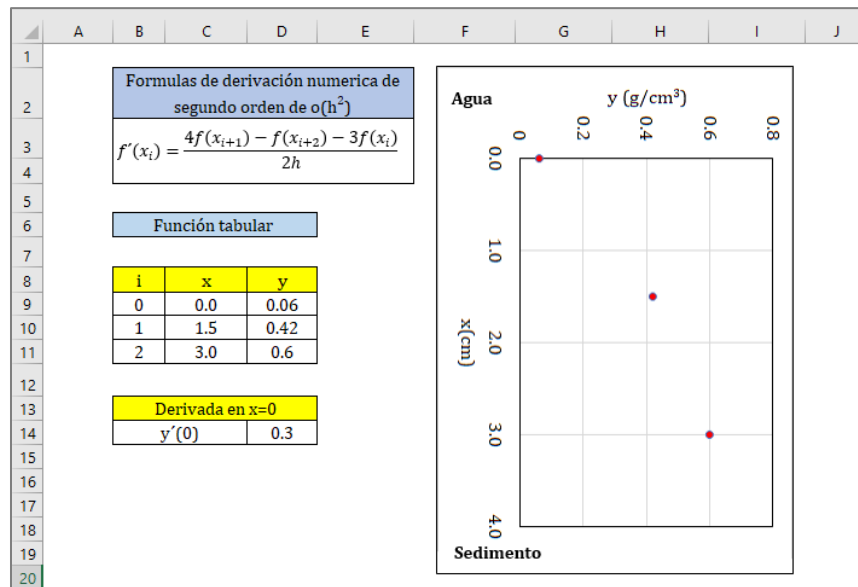


FIGURA 4.14. Concentración vs profundidad en la interfase sedimento-agua.

Paso III: Cálculo del flujo de masa contaminante empleando la Ley de Fick con $D = 1.52 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$.

$$\text{Flujo de masa} = -D \frac{dc}{dx} = -(1.52 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}) \cdot (3 \times 10^{-7} \text{ gr/cm}^4)$$

$$\text{Flujo de masa} = -4.56 \times 10^{-13} \text{ gr/cm}^2 \text{ s}$$

El signo negativo indica que el flujo es en dirección hacia abajo.

Paso IV: Cálculo de la cantidad de contaminante transportado hacia el lago de $3.6 \times 10^6 \text{ m}^2$ de sedimento durante un año.

$$3.6 \times 10^6 \text{ m}^2 = 3.6 \times 10^6 \text{ m}^2 \frac{10^4 \text{ cm}^2}{\text{m}^2} = 3.6 \times 10^{10} \text{ cm}^2$$

$$1 \text{ año} = 3.154 \times 10^7 \text{ s}$$

$$\begin{aligned} \text{cantidad de contaminante} &= |\text{Flujo de masa}| \cdot (\text{área de sedimento}) \\ &= 4.56 \times 10^{-13} \text{ gr/cm}^2 \text{ s} \cdot (3.6 \times 10^{10} \text{ cm}^2) \\ &= 1.64 \times 10^{-2} \text{ gr/s} \end{aligned}$$

por año equivale a:

$$\begin{aligned} \text{cantidad de contaminante} &= 1.64 \times 10^{-2} \text{ gr/s} \cdot (3.154 \times 10^7 \text{ s/1 año}) \\ &= 5.18 \times 10^5 \text{ gr/año} \end{aligned}$$

En kilogramos la cantidad de contaminante corresponde aproximadamente a 518 kg/año.

4.4 Ejercicio de aplicación: Cálculo de consumo de energía eléctrica en un horario nocturno

En esta sección se procederá a realizar un estudio de caso de integración y diferenciación numérica de interés en el campo de ingeniería ambiental a partir de un conjunto de datos. Para el desarrollo del problema se emplea una hoja de cálculo Excel.

Ejemplo 4.5**Consumo de energía en el condado de San Diego en una madrugada**

La tabla da el consumo de energía eléctrica (en megawatt) en el condado de San Diego el 8 de diciembre de 1999 desde medianoche hasta las 6:00 a.m. (fuente San Diego gas and Electric).

t	0:00	0:30	1:00	1:30	2:00	2:30	3:00
p(Mwatt)	1814	1735	1686	1646	1637	1609	1604

t	3:30	4:00	4:30	5:00	5:30	6:00
p(Mwatt)	1611	1621	1666	1745	1886	2052

Empleando una hoja de cálculo Excel insertar la fórmula de la regla del trapecio para estimar la energía en GWh (gigawattios-hora) consumida durante el periodo presentado en la tabla. (considere que la potencia es la derivada de la energía).

Paso I: Conversión de unidades y problema matemático. Según los datos el registro de consumo es cada 30 minutos que es equivalente a 0.5 hora, $t_0 = 12:00 \text{ a. m.} = 0:00 = 0 \text{ h}$, y la potencia se convierte de MW a GW. Así

x (h)	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0
y (Gwatt)	1.814	1.735	1.686	1.646	1.637	1.609	1.604

x (h)	3.5	4.0	4.5	5.0	5.5	6.0
y (Gwatt)	1.611	1.621	1.666	1.745	1.886	2.052

donde $t = x$ y $y = f(x) = p$. Ahora partiendo de la definición de potencia $p = dU/dt$, se tiene que al despejar a U , obtenemos

$$U = \int_0^6 f(x) dx$$

con U en unidades GWh. El problema se resume en determinar el área bajo la curva de la función tabular.

Paso II: Personalizar la hoja de cálculo para efectuar la integración de $f(x)$. Insertar los datos y calcular los parámetros de integración y diferenciación.

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1													
2													
3													
4													
5													
6													
7													
8													
9													
10													
11													
12													
13													
14													
15													
16													
17													
18													
19													
20													
21													
22													
23													
24													
25													
26													
27													

Regla del Trapecio			
Función tabular			
i	x	y	y''
0	0.0	1.814	0.204
1	0.5	1.735	0.12
2	1.0	1.686	0.036
3	1.5	1.646	0.124
4	2.0	1.637	-0.076
5	2.5	1.609	0.092
6	3.0	1.604	0.048
7	3.5	1.611	0.012
8	4.0	1.621	0.14
9	4.5	1.666	0.136
10	5.0	1.745	0.248
11	5.5	1.886	0.1
12	6.0	2.052	-0.05

limites de integración				Incremento	
a	0.00	n	12		
b	6.00	h	0.5		

Formulas de derivación numerica de segundo orden de o(h ²)	
Hacia adelante	$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 5f(x_i) + 2f(x_{i-1})}{h^2}$
Hacia atrás	$f''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{h^2}$
Centrada	$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2}$

FIGURA 4.15. Personificación de hoja de cálculo y función tabulada.

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
1														
2														
3														
4														
5														
6														
7														
8														
9														
10														
11														
12														
13														
14														
15														
16														
17														
18														
19														
20														
21														
22														
23														
24														
25														
26														
27														
28														

Regla del Trapecio			
Función tabular			
i	x	y	y''
0	0.0	1.814	0.204
1	0.5	1.735	0.12
2	1.0	1.686	0.036
3	1.5	1.646	0.124
4	2.0	1.637	-0.076
5	2.5	1.609	0.092
6	3.0	1.604	0.048
7	3.5	1.611	0.012
8	4.0	1.621	0.14
9	4.5	1.666	0.136
10	5.0	1.745	0.248
11	5.5	1.886	0.1
12	6.0	2.052	-0.05

limites de integración				Incremento	
a	0.00	n	12		
b	6.00	h	0.5		

Formulas de derivación numerica de segundo orden de o(h ²)			
Hacia adelante	$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 5f(x_i) + 2f(x_{i-1}))}{h^2}$		
Hacia atrás	$f''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3}))}{h^2}$		
Centrada	$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2}$		

Valor de la integral				Error estimado	
I.T	10.19	E.a%	1.09		

FIGURA 4.16. Cálculo de integral por la regla del trapecio y su error estimado.

Paso III: Calcular la integral con su respectivo error estimado. Para hallar el error estimado se calcula la derivada numérica de orden 2 en cada punto definido por x e y . Nótese que acorde a la ubicación de los puntos: la derivada hacia adelante se calcula solo en la celda

E7, la derivada hacia atrás en la celda E19 y la derivada centrada en la celda E8. Posteriormente se arrastra el cálculo hasta la celda E18.

Paso IV: Hacer la gráfica de la región de integración. Se seleccionan las celdas con los valores x e y y se accede a la opción de gráfico de área. Personalizando el gráfico con las opciones de Excel se puede visualizar la unión de los trapecios, tal y como se muestra en la Fig.4.17.

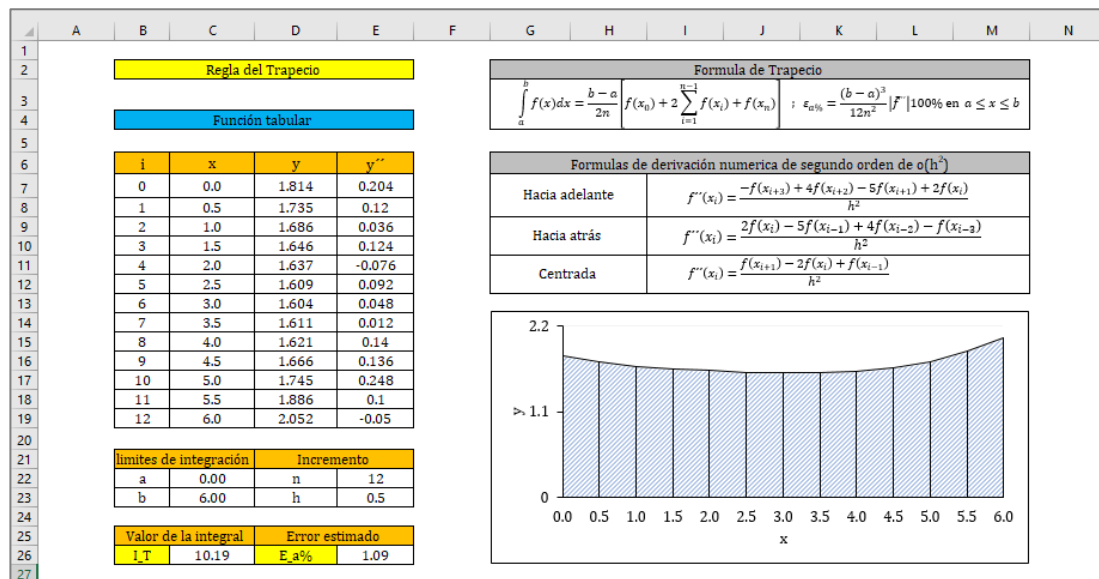


FIGURA 4.17. Cálculo numérico de la regla del trapecio en Excel.

Empleando la regla del trapecio en una hoja de cálculo Excel se obtiene que la energía consumida en el condado de San Diego, en la madrugada del 8 de diciembre de 1999 corresponde aproximadamente a 10.19 GWh con un error estimado en el cálculo de 1.09%. En ingeniería ambiental se analizan este tipo de resultados (los relacionados con el consumo de energía eléctrica) para estudiar el impacto en el medio ambiente entre los cuales destacan: explotación de recursos naturales, pérdida de biodiversidad, contaminación de agua y suelos y las emisiones de CO₂. No obstante, para minimizar tales impactos se generan planes de eficiencia energética que permitan lograr un mayor aprovechamiento de la energía.

4.5 Ejercicios propuestos

Observación:

- Resolver cada uno de los ejercicios planteados haciendo uso de la hoja de cálculo Excel.
- Construir las matrices numéricas correspondiente a cada modelo.
- Representar gráficamente las áreas aproximadas, en el caso de la regla Simpson los segmentos parabólicos.

1.- El peso promedio de los residuos tóxicos peligrosos generados por 500 industrias es de 151 toneladas métricas (t), con una desviación estándar de 15 toneladas (Quevedo, 2006). Si los pesos de los residuos tóxicos generados por estas industrias están normalmente distribuidos:

- a) Utilizar la regla de punto medio con un número de rectángulos igual a 10 para estimar cuántas industrias generan entre 120 t y 155 t de residuos tóxicos peligrosos.
- b) Resolver el inciso anterior empleando la regla del trapecio.
- c) Utilizar la regla de Simpson 1/3 con $n=10$ para estimar cuántas industrias generan más de 75 t pero menos de 125 t de residuos tóxicos peligrosos.



Inspector gestionando residuos peligrosos. Para la gestión de los residuos industriales, la ley obliga a los empresarios a mantenerlos en óptimas condiciones hasta su entrega a un gestor autorizado utilizando el transporte de desechos registrado y acreditado por las autoridades, además de cancelar los costes del proceso. Fotografía: Leonardo García (Leonardo-Redes)

2.- El periodo de retorno T es el tiempo que transcurre para que un evento extremo (Inundaciones, huracanes, temperaturas extremas) sea excedido o igualado, al menos una vez en promedio. Supóngase que una variable aleatoria x propia a caudales máximos tiene una distribución de Gumbel con media $\mu = 81 \text{ m}^3/\text{s}$ y desviación estándar $\sigma = 23 \text{ m}^3/\text{s}$, el tiempo de retorno T (años) correspondiente a un flujo $Q_{\max} = 91 \text{ m}^3/\text{s}$ se calcula mediante la siguiente la relación

$$T = 1 / \left[1 - \int_0^{Q_{\max}} \frac{1}{\alpha} e^{-(x-\beta)/\alpha} - e^{-(x-\beta)/\alpha} dx \right] ; \quad \begin{aligned} \sigma^2 &= 1.645\alpha^2 \\ \mu &= \beta + 0.577\alpha \end{aligned}$$

siendo el denominador la **probabilidad de excedencia** y el integrando la **densidad de probabilidad de Gumbel** de valores máximos de dos parámetros (Mejía, 2006).

- Estimar el tiempo de retorno usando la regla Simpson con $n=20$.
- Comparar el resultado con el que se obtiene directamente de la siguiente relación:

$$T = 1 / \left[1 - e^{-e^{-(x-\beta)/\alpha}} \right]$$

¿Se presenta alguna discrepancia en los resultados?, de ser así ¿Por qué y cómo puede mejorarse?

- Investigar la importancia de la distribución de Gumbel en la ingeniería ambiental.

3.- En la práctica, la distribución logarítmica normal (log-normal) ocurre siempre que se encuentre una variable aleatoria, tal que su logaritmo tenga una distribución normal. Su densidad de probabilidad está dada por:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} x^{-1} e^{-(\ln x - \mu)^2 / 2\sigma^2} ; \quad x > 0, \sigma > 0$$

con μ = media y σ = desviación estándar. En efecto como parte de un análisis de prevención de riesgos ambientales con respecto a una planta de energía nuclear, los ingenieros deben modelar las resistencias de materiales (Pa) de los soportes de un generador de vapor en términos de su habilidad para soportar la aceleración pico (g) causada por los terremotos (Miller, Freund y Johnson, 2011).



Accidente nuclear de Fukushima (Japón). El 11 de marzo de 2011 Japón se vio sacudido por el que se conocería como el gran terremoto del Japón oriental (Tohoku). El sismo de magnitud 9.0 junto con un tsunami con olas de 14 metros causó el accidente en la central nuclear de Fukushima Daiichi (considerado de nivel 7) provocando la emisión de gases radioactivos, elementos volátiles y líquidos, en especial hacia la costa oceánica. Fotografía: ETHIC

La opinión de los expertos sugiere que el logaritmo $\ln(\text{resistencia})$ se distribuye normalmente con $\mu = 4.0$ y $\sigma^2 = 0.09$. La probabilidad de que los soportes sobrevivirán a una aceleración pico a_{\max} es:

$$p(x) = 1 - \int_0^{a_{\max}} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} x^{-1} e^{-(\ln x - \mu)^2 / 2\sigma^2} dx$$

Utilizar la regla de punto medio con un número de rectángulo igual a 30 para estimar la probabilidad de que los soportes sobrevivan a una aceleración pico de 55 g.

4.- Para estimar el tamaño de una presa nueva y aprovechar de forma óptima el recurso hídrico, usted tiene que determinar el volumen total de agua (m^3) que fluye por un río en un año. Si se dispone de los datos históricos promedios para el río:

Fecha	Enero	Febrero	Marzo	Abril	Mayo	Junio	Julio
Flujo (m^3/s)	30	38	82	125	24	95	75
Fecha	Agosto	Septiembre	Octubre	Noviembre	Diciembre		
Flujo (m^3/s)	60	20	22	24	35		

- Utilizar la regla de trapecio para hallar el volumen. Estimar el error porcentual aproximado $\varepsilon_a\%$ del cálculo.
- Investigar acerca de la importancia que tiene el uso y aprovechamiento de los recursos hídricos.

Sugerencia: Tenga cuidado con las unidades.

5.- Unas de las grandes aplicaciones de la **teledetección ambiental** es que permite cartografiar el flujo del petróleo en regiones específicas, así como la vigilancia del derrame del producto. Considerando la anterior, la Fig. 4.18 muestra la superficie de un derrame de petróleo. Si el espesor promedio de la mancha es de 6.21×10^{-7} millas:

- Estimar el volumen (m_i^3) del petróleo derramado usando la regla de los trapecios. Hallar el error porcentual aproximado $\varepsilon_a\%$ del cálculo.
- Resolver el inciso anterior usando la regla Simpson 1/3. Estimar el error porcentual aproximado $\varepsilon_a\%$ del cálculo.

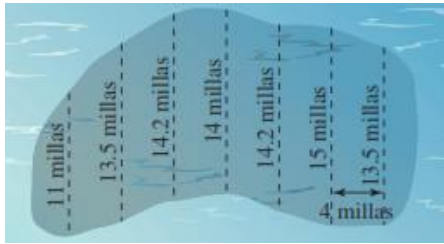


FIGURA 4.18. Mancha de petróleo sobre el mar.

- c) Utilizar los resultados para indicar cuántos barriles se derramaron.
- d) Investigar el impacto ambiental que generan estos derrames.



Imagen satelital de un derrame de petróleo en el mar de Lima. El 15 de enero del año 2022 se produjo el derrame de 6 mil barriles de petróleo, afectando una zona de alrededor de 1 millón 739 metros cuadrados. El hecho es considerado por el gobierno peruano como “el peor desastre ecológico en Lima en los últimos tiempos. Fotografía: El Comercio (PlanetScope / Conservación Amazónica).

6.- El área de la superficie horizontal A_s (m^2) de un lago a cierta profundidad se calcula a partir del volumen por medio de la diferenciación:

$$A_s(z) = -\frac{dV}{dz}(z)$$

donde V = volumen (m^3) y z =profundidad (m) (se mide a partir de la superficie en dirección del fondo). La concentración promedio (g/m^3) de una sustancia contaminante que varía con la profundidad se obtiene por integración:

$$\bar{c} = \frac{1}{A} \int_0^Z c(z) A_s(z) dz \quad , \quad A = \int_0^Z A_s(z) dz$$

donde Z = profundidad total (m). Determinar la concentración promedio con base a los siguientes datos:

z, m	0	4	8	12	16
V, $10^6 m^3$	9.8175	5.1051	1.9635	0.3927	0.0000
c, g/m^3	10.2	8.5	7.4	5.2	4.1

7.- La producción de aguas residuales (y el correspondiente uso de agua) dependen del tiempo conforme los hogares y otros usuarios del sistema incorporan el agua dentro de su estilo de vida diaria. La Fig. 4.19 muestra los flujos de agua residual Q medidos diariamente para una población de aproximadamente 420 personas que habitan cierta comunidad. El volumen de agua consumido se calcula mediante la siguiente integral:

$$V = \int_{t_i}^{t_f} Q dt \quad (\text{L})$$

- Estimar el volumen (L) de agua consumida usando la regla de los trapecios. Hallar el error porcentual aproximado $\varepsilon_a\%$ del cálculo.
- Estimar el volumen (L) de agua consumida usando la regla de Simpson 1/3. Hallar el error porcentual aproximado $\varepsilon_a\%$ del cálculo.



Planta de tratamiento de aguas residuales. El agua contaminada se vuelve potable. El objetivo de las plantas de tratamiento es remover del agua las impurezas de tipo biológicos (bacterias, virus y materia orgánica en descomposición), químicos (elementos químicos que alteran su composición, metales pesados, entre otros.) o físicos (tierra, polvo, fango, entre otros.) y así permitir que el agua tratada sea nuevamente aprovechable. Fotografía: Enciclopedia Concepto (Editorial Etecé).

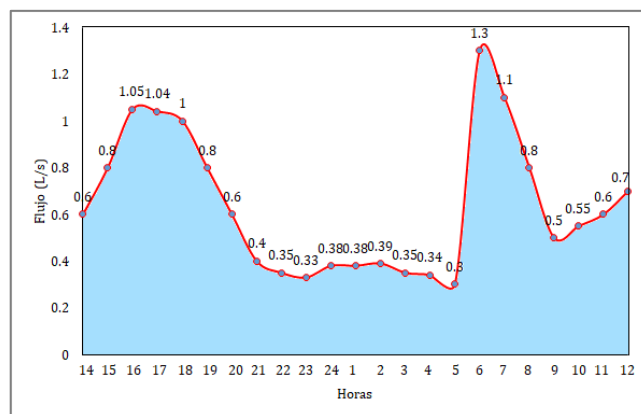


FIGURA 4.19. Flujo de distribución de aguas residuales durante 22 horas.

- Investigar la importancia de estimación de flujos de agua y de las aguas residuales.

8.- La ley de radiación de Planck establece que:

$$I(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)} \quad \text{W/m}^3$$

donde $I(\lambda, T)$ = intensidad de radiación emitida por un cuerpo negro con una cierta temperatura T (K) y longitud de onda λ (m). Se tiene que las constantes son $h = 6.62 \times 10^{-34}$ J.s (constantes de Planck), $k = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K (constante de Boltzmann) y $c = 3.0 \times 10^8$ m/s (velocidad de la luz en el vacío). Esta ley es de gran aplicabilidad en meteorología y en el estudio del cambio climático. La radiación emitida por un cuerpo negro como el sol (radiación solar) en un intervalo de longitudes de onda λ_1 y λ_2 se calcula a partir de ley de Planck mediante la siguiente integral:

$$R(\lambda, T) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} I(\lambda, T) d\lambda \quad \text{W/m}^2$$

Dado que la temperatura del sol es de 5778 K y aproximadamente un 99% de la radiación solar que llega a la superficie de la Tierra está contenida en la banda del **ultravioleta, visible y el infrarrojo cercano** con longitudes de onda entre 0.2 y 3.0 micrómetros. Para estos valores:

- Utilizar la regla del trapecio con $n = 20$ para estimar la radiación solar.
- Resolver el inciso anterior empleando la Regla Simpson 1/3.
- Comparar los resultados con el que se obtiene directamente de la ley de Stefan-Boltzmann, esto es:

$$R(T) = \sigma T^4$$

siendo $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{W/m}^2 \text{K}^4$ (constante de Stefan- Boltzmann). ¿Se presenta alguna discrepancia en los resultados?, de ser así ¿Por qué y cómo puede mejorarse?

- Investigar la importancia del estudio de la radiación en la ingeniería ambiental.

9.- Durante el verano los lagos de zona templada llegan a dividirse en estratos térmicos. Como muestra la Fig. 4.20 cerca de la superficie el agua es tibia y ligera (**epilimnion**) y en el

fondo es más fría y densa (*hipolimnion*) así la separación entre ambas masas es un plano conocido como termoclina.

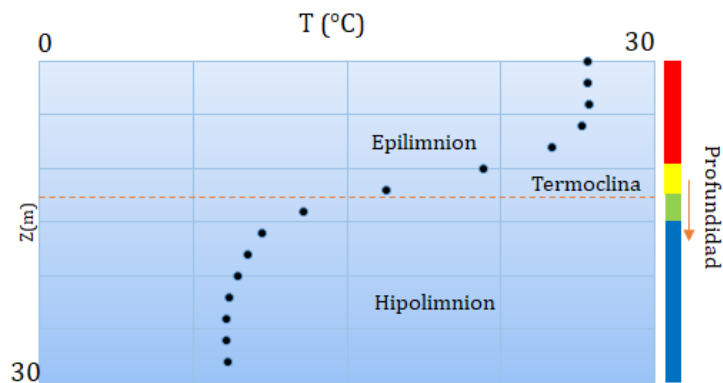


FIGURA 4.20. Capas térmicas de un lago durante el verano.

La localización de la termoclina es el punto de inflexión de la curva temperatura - profundidad esto es $T''(z) = 0$ y también el punto donde el gradiente $|T'(z)|$ es un máximo. Dadas las siguientes mediciones de temperaturas en las profundidades de un lago

Temperatura	22.800	22.794	22.837	22.623	21.653	19.412	16.265	13.583
Profundidad	0	-2	-4	-6	-8	-10	-12	-14

Temperatura	12.248	11.748	11.432	11.175	11.054	11.065	11.100
Profundidad	-16	-18	-20	-22	-24	-26	-28

- a) Utilizar la diferenciación numérica para obtener $T'(z)$ y $T''(z) = 0$. A partir de estos resultados graficar $T(z)$, $T'(z)$ y $T''(z) = 0$.
- b) Estimar acorde a los resultados obtenidos el valor máximo del gradiente, la localización de la termoclina y la temperatura.
- c) Investigar la importancia del estudio de la estratificación térmica para los ingenieros ambientales.

10.- La ecuación de Rosin-Rammler-Bennet (RRB)

$$F(x) = 1 - e^{-(x/x')^{n'}}$$

describe la distribución de los tamaños de polvo fino, donde $F(x)$ = masa acumulada de las partículas de polvo de diámetro x (μm), x' y n' son constantes. Dado $x' = 30 \mu m$ y $n' = 1.44$.

- Generar una tabla de valores de $F(x)$ con $h = 0.2$ en el intervalo $[0, PM_{10} = 10 \mu m]$. Las PM_{10} son aquellas partículas sólidas o líquidas de polvo dispersas en la atmósfera cuyo diámetro varía entre 2.5 y $10 \mu m$.
- Calcular en forma numérica a partir del resultado anterior la distribución de la densidad de masa $f(x) = F'(x)$.
- Graficar la distribución de densidad de masa $f(x)$ y la distribución acumulada $F(x)$.
- Calcular la moda del tamaño de la distribución de masa, es decir, el tamaño en que $f'(x) = 0$.
- Encontrar el área superficial de masa de polvo por medio de



Escenarios de calidad del aire. La calidad del aire de muchas ciudades del planeta se ha visto perjudicada como consecuencia de la emisión de gases contaminantes. Dependiendo de su tamaño, las partículas que forman el gas se comportan de manera distinta en la atmósfera: las más pequeñas se pueden mantener suspendidas durante largos periodos y viajar cientos de kilómetros mientras que las partículas más grandes no se sostienen en el aire mucho tiempo y tienden a depositarse más cerca de su lugar de origen. Fotografía: Laura Fernández Roldan (Ecología Verde).

$$S_m = \frac{6}{\rho} \int_{d_{\min}}^{PM_{10}} \frac{f(x)}{x} dx$$

con $\rho = 1 \text{ g/cm}^3$, $d_{\min} = 1 \mu m$ y $PM_{10} = 10 \mu m$. Calcular la integral por medio de la regla del trapecio y la regla Simpson $1/3$.

4.6 Proyecto para grupo: Hidrogeometría de una corriente

La hidrogeometría de una corriente de agua consiste en especificar sus características hidrológicas (velocidad, caudal, dispersión) y su geometría (profundidad, ancho, área transversal, pendiente). Los cálculos de las características hidrológicas son ampliamente utilizados por los ingenieros ambientales para realizar estudios de abastecimiento de agua y transporte de contaminantes a lo largo de los caudales (Chapra, 2008).

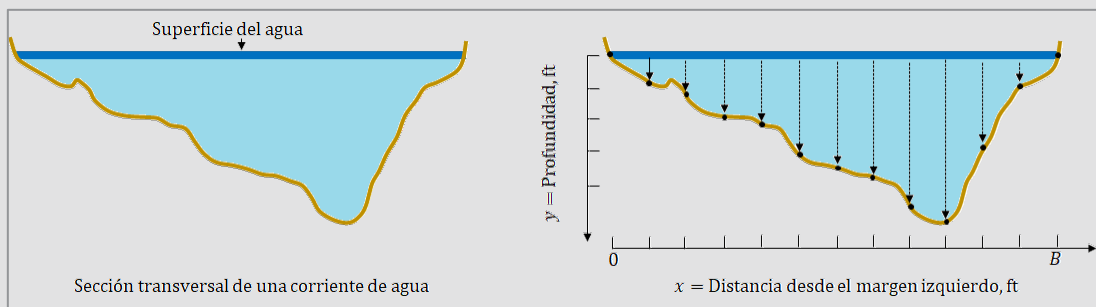


FIGURA 4.21. Hidrogeometría de una corriente.

La Fig. 4.21 representa una sección transversal de una corriente y la forma de tomar datos de profundidad y (en pies ft) en función de la distancia del margen izquierdo x (en pies ft). Comúnmente los puntos de los datos representan ubicaciones en las que se ancló un barco y se hicieron mediciones de la profundidad. A partir de los datos de profundidad y anchura se puede estimar el área transversal mediante la siguiente integral:

$$A_T = \int_0^B y(x) dx \quad (ft^2)$$

donde B = Ancho total del canal (ft), y = profundidad (ft), y x = distancia desde unos de los márgenes (ft). En forma similar el flujo promedio \bar{Q} se calcula por medio de:

$$\bar{Q} = \int_0^B \bar{U}(x)y(x) dx \quad (ft^3/s)$$

siendo \bar{U} la velocidad del agua (ft/s). Nótese que la integral para hallar Q requiere el cálculo del promedio de la velocidad. En este contexto se tienen que para un conjunto de datos de velocidad (Métodos de profundidad de dos puntos y seis décimas) se tiene que:

- Para aguas más profundas, profundidad > 0.61 m (2 pies), las velocidades tomadas al 20% y 80% de la profundidad total se promedian.
- Para aguas menos profundas, profundidad < 0.61 m, se toma una única medida de velocidad en 60% de la profundidad.

La Fig. 4.22 muestra una tabla de datos que proporciona los valores de profundidad, distancia de márgenes y velocidad (Fuente: Chapra 1997). Los datos fueron recolectados en Boulder Creek, Colorado el 23 de diciembre de 1994. La pendiente en el lugar de muestreo es de aproximadamente 0.004. A partir de los valores presentados (tabla de la Fig. 4.22) realice en una hoja de cálculo Excel lo siguiente:

x (ft)	0	3	6	9	12	15	18	21	24	27	30	33	36	39	42	45	48	51	54
y (ft)	0	1.3	1.25	0.85	1.2	1.85	1.9	1.75	1.9	2.25	2.4	2.1	1.5	1	1.3	1.2	1	0.8	0
$U_{60\%}$ (ft/s)		0.3	0.35	0.48	0.46	0.58	0.7	0.68	0.67				0.37	0.25	0.09	0.13	0.1	0.08	0
$U_{20\%}$ (ft/s)										0.4	0.4	0.29							
$U_{80\%}$ (ft/s)										0.68	0.62	0.5							

FIGURA 4.22. Datos hidrométricos de Boulder Creek

- Efectuar un bosquejo del área transversal similar al de la Fig. 4.21.
- Emplear algún método numérico de integración para determinar A_T y \bar{Q} .
- Bosquejar la geometría del método de integración utilizado.
- Calcular el error numérico aproximado.
- Calcular la profundidad media, el coeficiente de dispersión longitudinal y la distancia necesaria para obtener una mezcla lateral.
- Investigar la importancia de la hidrogeometría para el manejo y aprovechamiento de los recursos hídricos.

CAPÍTULO 5

SOLUCIÓN NUMÉRICA DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS

En este capítulo se estudiarán las técnicas numéricas que permiten obtener soluciones numéricas de problemas de valores iniciales (PVI) y problemas con valores en la frontera (PVF).

5.1. Solución numérica de un PVI de primer orden.

5.2. Método de Runge-Kutta

5.3. Sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias.

5.4. Solución numérica de un PVF de segundo orden (PVF).

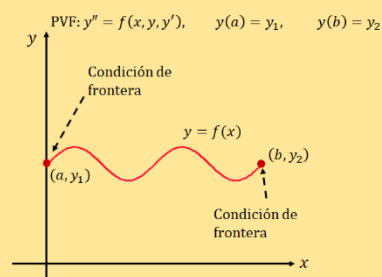
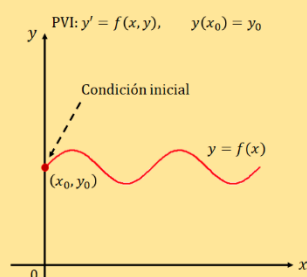
5.5. Ejercicio de aplicación: Dinámica de población depredador - presa.

5.6. Ejercicios propuestos.

5.7. Proyecto para grupo: Dinámica de fluido atmosférico.



Los ingenieros ambientales modelan diversos problemas que implican ecuaciones diferenciales ordinarias. Uno de ellos (ampliamente utilizado) es el modelo llamado depredador-presa el cual se utiliza en el estudio de ciclos de nutrientes y contaminantes tóxicos en las cadenas alimenticias acuáticas y en sistemas de tratamiento biológicos. En la sección 6.6 se presenta un modelo simple para la dinámica de población depredador - presa conocido como modelo de Lotka-Volterra. Fotografía: Bachillerato Virtual (Plataforma Educativa).



Problema de valor inicial y problema con valor en la frontera.

5.1 Solución numérica de un PVI de primer orden

Considérese el siguiente problema de valor inicial de primer orden (PVI),

$$\text{Resolver: } y' = f(x, y) \quad \text{Sujeto a: } y(x_0) = y_0 \quad (5.1)$$

donde y_0 es una constante real arbitraria dada. El problema consiste en buscar una solución $\varphi(x)$ (llamada **integral de la ecuación**) de una ecuación diferencial en un intervalo I que contenga a x_0 , tal que su gráfica (llamada **curva integral**) pase por el punto dado (x_0, y_0) , (ver gráfico del lado izquierdo Fig. 5.1).

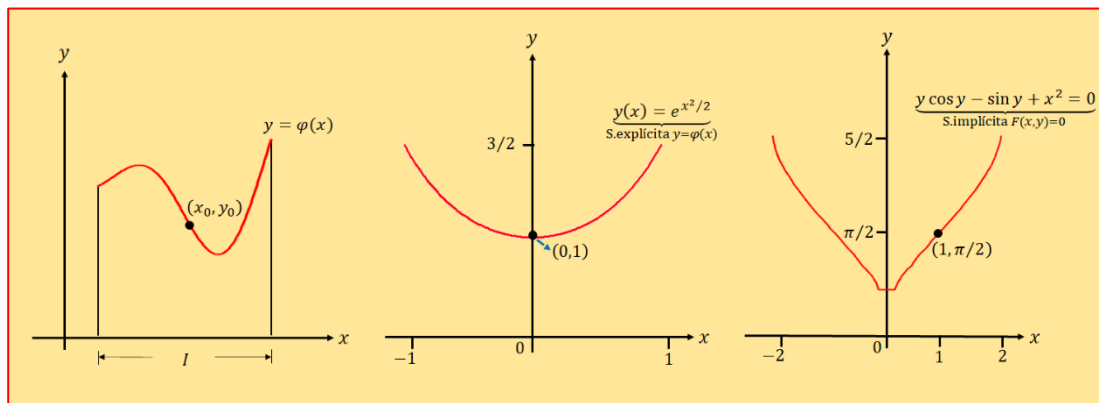


FIGURA 5.1. Curvas integrales.

Ahora bien, conforme a la estructura del PVI de la Ec. 5.1 el problema puede tener una solución exacta de tipo explícita $y = \varphi(x)$ o una solución exacta de tipo implícita $F(x, y) = 0$ (que define una función $\varphi(x)$ implícitamente). En este sentido se tiene el siguiente par de ejemplos particulares:

$$y' = \underbrace{xy}_{f(x,y)} \quad ; \quad y(0) = 1 \quad \text{solución} \quad \underbrace{y(x) = e^{x^2/2}}_{\text{S.explicita } y=\varphi(x)} \quad (5.2)$$

$$y' = \underbrace{2x(y \sin y)^{-1}}_{f(x,y)} \quad ; \quad y(1) = \pi/2 \quad \text{solución} \quad \underbrace{y \cos y - \sin y + x^2 = 0}_{\text{S.implícita } F(x,y)=0} \quad (5.3)$$

donde las curvas integrales de ambas soluciones se muestran en la parte central y en el lado derecho de los gráficos de la Fig. 5.1. No obstante, existen PVI donde al emplear métodos analíticos no se pueden obtener soluciones exactas en términos de funciones fundamentales. Sin embargo, para este tipo de escenario es posible construir una solución aproximada utilizando métodos numéricos.

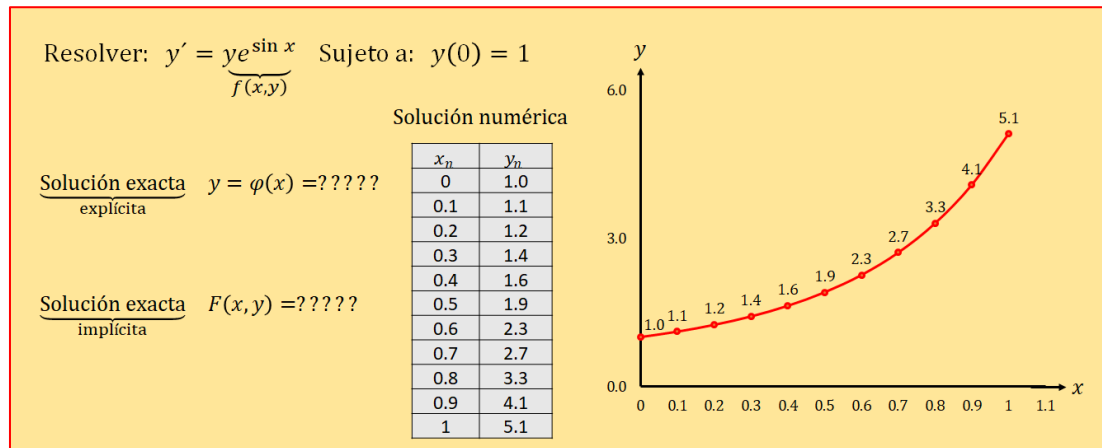


FIGURA 5.2. Solución numérica, método RK4, de $y' = ye^{\sin x}$, $y(0) = 1$ en $[0, 1]$ con $h = 0.1$.

Independientemente de si se puede realmente encontrar una solución explícita o implícita, si existe una solución de una ecuación diferencial, ésta se representa por una curva suave en el plano cartesiano. La idea básica detrás de cualquier método numérico para resolver un PVI de primer orden es de alguna manera aproximar los valores de y de una solución para valores de x preseleccionados. Primeramente se parte con un punto inicial dado (x_0, y_0) de una curva solución y seguidamente se procede a calcular paso por paso una secuencia de puntos $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ cuyas coordenadas y , y_i se aproximan a las coordenadas y , $y(x_i)$ de los puntos $(x_1, y(x_1)), (x_2, y(x_2)), \dots, (x_n, y(x_n))$ que yacen sobre la gráfica de la solución normalmente desconocida (Zill y Wrigth, 2015). Tomando las coordenadas x más cercanas y uniendo los puntos por segmentos cortos se obtiene una curva poligonal cuyas características son cercanas a la curva integral de la solución real. El dibujo de curvas es algo que bien se puede hacer en una computadora. En tal sentido se puede decir que existen programas de cómputo escrito para implementar métodos numéricos o para mostrar una representación

visual de una solución aproximada que ajuste los datos numéricos producidos por este segundo método, a este tipo de programas se les conoce como **solucionadores numéricos** (Zill, 2018). En la Fig. 5.2 se presenta (a manera de ilustración) la conexión natural entre los puntos de la gráfica producidos por un solucionador numérico para el PVI $y' = ye^{\sin x}$, $y(0) = 1$ en el intervalo $[0,1]$ obtenida con el método RK4 (presentado en la Sec. 5.3) usando el tamaño de paso $h = 0.1$.

5.1.1 Método Euler: Aproximación por rectas tangentes

Dado un PVI

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \quad (5.4)$$

que tiene una solución desconocida $y(x)$. Una manera de aproximarse a la solución es empleando el método de Euler, el cual posee la siguiente estructura matemática:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad x_{i+1} = x_i + h, \quad i = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (5.5)$$

donde f es la **función pendiente** obtenida de la ecuación diferencial $y' = f(x, y)$ (Nagle, Saff y Snider, 2005). El uso recursivo de la formulación para $i = 0, 1, 2, 3, \dots$ produce las coordenadas y : y_1, y_2, y_3, \dots de puntos en **rectas tangentes** sucesivas respecto a la curva solución en x_1, x_2, x_3, \dots o $x_{i+1} = x_i + h$, donde h es el tamaño del paso entre x_i y x_{i+1} . Los valores y_1, y_2, y_3, \dots aproximan los valores de una solución $y(x)$ del PVI en x_1, x_2, x_3, \dots . Geométricamente la pendiente estimada $f(x_i, y_i)$ se usa para extrapolar desde un valor anterior y_i a un nuevo valor y_{i+1} en una distancia h tal como se aprecia en los gráficos de la Fig. 5.3.

Por otro lado, se tiene que al resolver numéricamente un PVI se presentan dos tipos de error: En primer lugar, se encuentra el error de **redondeo** el cual se produce debido a que los diferentes tipos de calculadoras y computadoras sólo pueden representar números finitos de dígitos. En segundo lugar, se tiene el **error de truncamiento** que a su vez se divide en dos, el **local** que resulta de la aplicación del

método considerado en cada paso y el **propagado** que resulta de las aproximaciones producidas durante los pasos previos. Con la suma de ambos se obtiene el error de **truncamiento total**.

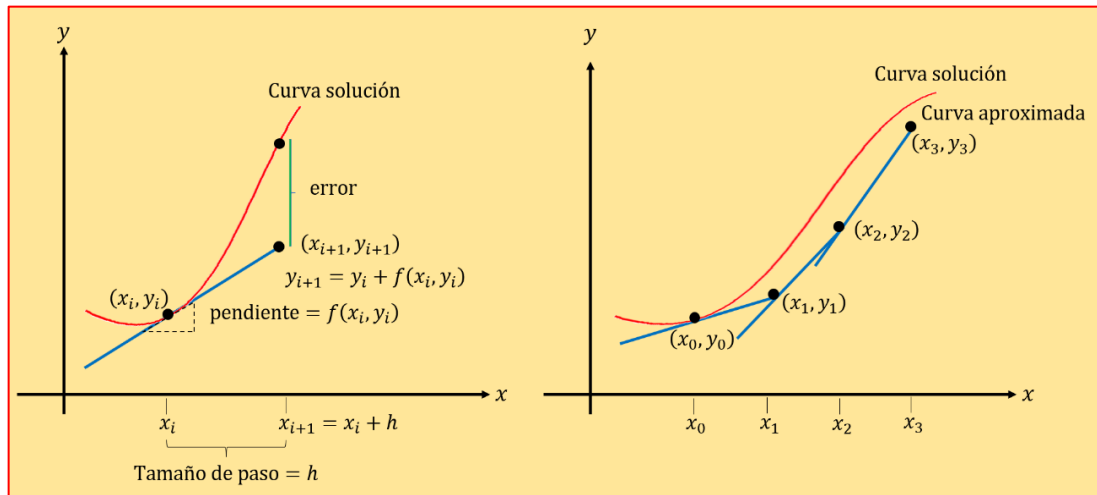


FIGURA 5.3. Aproximación de $y(x)$ por rectas tangentes interpoladas.

Particularmente el error de truncamiento local se obtiene a partir de la serie de Taylor al expandir en diferencias hacia adelante, esto es:

$$y(x_{i+1}) = \underbrace{y_i + hf(x_i, y_i)}_{\text{Fomula de Euler}=y_{i+1}} + \underbrace{O(h^2)}_{\text{Error de truncamiento local}} \quad (5.6)$$

Nótese que el método de Euler corresponde a la serie de Taylor hasta el término $hf(x_i, y_i)$ y el error de truncamiento local es proporcional al cuadrado del paso. Sin embargo, la serie de Taylor no ofrece una medida del error propagado ni del error de truncamiento global. En términos generales se resalta en la literatura que si un método para la solución numérica de un PVI tiene un error de truncamiento local de orden h^{n+1} , entonces el error de truncamiento global es de orden h^n . No obstante, en el caso de aplicar el método de Euler, el error seria proporcional al tamaño del paso. A manera de ilustrar la dependencia en la precisión de la aproximación con el tamaño del paso h , en los gráficos de la Fig. 5.4 se mostrarán tanto la solución exacta

como la numérica para los distintos valores de h , esto al emplear el método de Euler en el PVI $y' = y \cos x$, $y(0) = 1$ en el intervalo $[0,4]$.

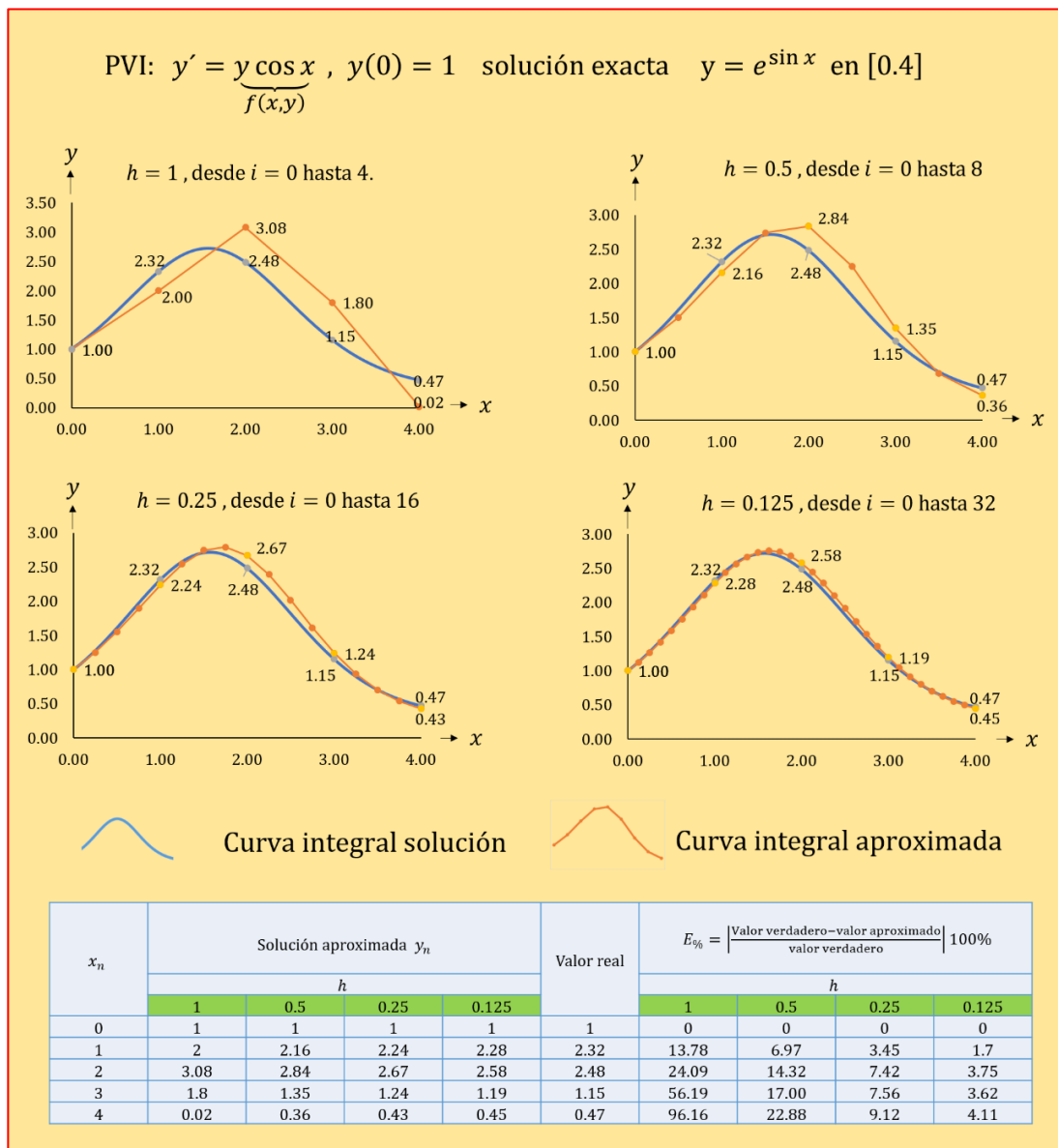


FIGURA 5.4. Solución exacta y numérica empleando el método Euler, de $y' = y \cos x$, $y(0) = 1$ en $[0,4]$ con $h = 1$, $h = 0.5$, $h = 0.25$ y $h = 0.125$.

Obsérvese que se puede reducir el error disminuyendo el tamaño del paso. Lo anterior hace que la curva integral aproximada empiece a tomar la forma de la curva integral solución. Cabe señalar que este procedimiento requiere un mayor cálculo

recursivo (que si se realiza manualmente resulta ser agotador), sin embargo se puede utilizar un solucionador numérico que facilite el desarrollo del mismo. Es de resaltar que la ventaja de aplicar el método de Euler en el cálculo y en la programación es su simplicidad, no obstante, se pierde la veracidad en sus aproximaciones. Acorde a la estructura del PVI dado en la Ec.5.4, se puede decir que en algunos casos el método de Euler logra proporcionar buenos resultados, pero este se utiliza comúnmente solo para ilustrar cómo los métodos numéricos pueden aproximar una solución a un PVI. Cabe mencionar que en la actualidad existen versiones mejoradas del método de Euler, una de ellas es el de método de Runge-Kutta de cuarto orden RK4, el cual destaca debido a la alta precisión que proporcionan sus resultados. Una versión mejorada del método Euler y el método RK4 se presentan en la Sec.5.2.

Ejemplo 5.1**Ecuación logística y especies en peligro**

Una organización de conservación libera 25 panteras de Florida en una zona de refugio. Después de 2 años hay 39 panteras en la zona. El refugio tiene una capacidad límite o de soporte de 200 panteras. Para este sistema: a) Escribir una **ecuación diferencial logística** que modele la tasa de crecimiento de la población de las panteras, b) Mediante el método de Euler con un tamaño de paso de $h = 1$, encontrar la población de panteras cada año hasta que el valor de la población no exceda la capacidad de soporte y c) Comparar la aproximación con la solución exacta.

Paso I: Identificar el problema matemático. Resolver la ecuación diferencial logística* con condiciones iniciales cuya estructura matemática viene dada por el siguiente PVI:

$$p'(t) = kp \left(1 - \frac{p}{L}\right) \quad , \quad p(0) = P_0$$

siendo dp/dt =Tasa de incremento de población de panteras, p = población en cualquier instante dado, t = el tiempo comúnmente en años, L =la capacidad limite o de soporte del refugio, k = la constante de crecimiento y p_0 =la población inicial. Conforme al

planteamiento $L = 200$ y $p_0 = p(0) = 25$ y haciendo $p = y$ y a $t = x$, el PVI se convierte en:

$$y'(t) = ky \left(1 - \frac{y}{200}\right) \quad , \quad y(0) = 25.$$

El problema tiene solución exacta que viene dada por:

$$y(x) = \frac{200}{1 + 7e^{-kx}}$$

Entonces dado que $y = 39$ cuando $x = 2$, se puede resolver para k

$$39 = \frac{200}{1 + 7e^{-k(2)}} \Rightarrow k = \ln \sqrt{39/23}$$

Así, un modelo para la población de pantera está dado por:

$$y(x) = \frac{200}{1 + 7e^{-\ln \sqrt{39/23} x}} \text{ solución de } y' = \ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{y}{200}\right) y, \quad y(0) = 25$$

Paso II: Determinar la solución numérica empleando el método de Euler con $h = 1$. Para ello se utilizará la fórmula dada en la Ec. 6.5 donde:

$$f(x, y) = \ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{y}{200}\right) y, \quad x_0 = 0 \text{ e } y_0 = 25$$

Partiendo de $i = 0$, $x_0 = 0$ e $y_0 = 25$

Cálculo de x_1

$$\begin{aligned} x_{0+1} &= x_0 + h \\ x_1 &= 0 + 1 \\ &= 1 \end{aligned}$$

Solución exacta en $x_1 = 1$

$$\begin{aligned} y(1) &= \frac{200}{1 + 7e^{-\ln \sqrt{39/23}(1)}} \\ &= 31.369 \end{aligned}$$

Solución numérica en $x_1 = 1$

Error relativo %

$$\begin{aligned}
 y_{0+1} &= y_0 + h \left[\ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{y_0}{200} \right) y_0 \right] \\
 &= 25 + 1 \left[\ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{25}{200} \right) 25 \right] \\
 y_1 &= 30.776
 \end{aligned}
 \quad
 E_{\%} = \left| \frac{31.369 - 30.776}{31.369} \right| 100\%$$

$$= 1.893\%$$

Continuando $i = 1$, $x_1 = 1$ e $y_1 = 30.776$

Cálculo de x_2

$$\begin{aligned}
 x_{1+1} &= x_1 + h \\
 x_2 &= 1 + 1 \\
 &= 2
 \end{aligned}$$

Solución exacta en $x_2 = 2$

$$\begin{aligned}
 y(2) &= \frac{200}{1 + 7e^{-\ln \sqrt{39/23}(2)}} \\
 &= 39.000
 \end{aligned}$$

Solución numérica en $x_2 = 2$

$$\begin{aligned}
 y_{1+1} &= y_1 + h \left[\ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{y_1}{200} \right) y_1 \right] \\
 &= 30.776 + 1 \left[\ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{30.776}{250} \right) 30.776 \right] \\
 y_2 &= 37.651
 \end{aligned}$$

Error relativo %

$$\begin{aligned}
 E_{\%} &= \left| \frac{39.000 - 37.651}{39.00} \right| 100\% \\
 &= 3.459\%
 \end{aligned}$$

Luego $i = 2$, $x_2 = 2$ e $y_2 = 37.651$

Cálculo de x_3

$$\begin{aligned}
 x_{2+1} &= x_1 + h \\
 x_3 &= 2 + 1 \\
 &= 3
 \end{aligned}$$

Solución exacta en $x_3 = 3$

$$\begin{aligned}
 y(3) &= \frac{200}{1 + 7e^{-\ln \sqrt{39/23}(3)}} \\
 &= 47.959
 \end{aligned}$$

Solución numérica en $x_3 = 3$

$$\begin{aligned}
 y_{2+1} &= y_2 + h \left[\ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{y_2}{200} \right) y_2 \right] \\
 &= 37.651 + 1 \left[\ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{37.651}{200} \right) 37.651 \right] \\
 y_3 &= 45.721
 \end{aligned}$$

Error relativo %

$$\begin{aligned}
 E_{\%} &= \left| \frac{47.959 - 45.721}{47.959} \right| 100\% \\
 &= 4.666\%
 \end{aligned}$$

Siguiendo el proceso de cálculo hasta $i = 20$ los resultados se muestran en la matriz de la Fig.5.5.

Paso III: Hacer la representación gráfica. La Fig. 5.2 muestra las solución exacta y numérica con sus respectivas gráficas mediante una hoja de cálculo en Excel.

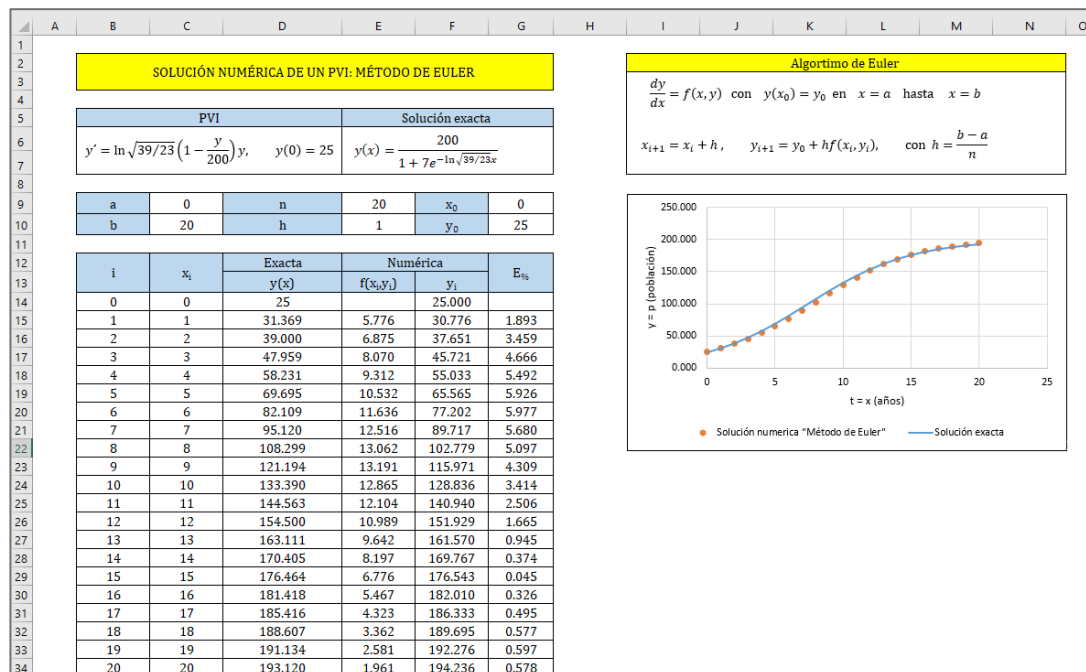


FIGURA 5.5. Comparación de la solución exacta y numérica con el método de Euler en una hoja de cálculo Excel.

Conforme a los resultados y al gráfico de la Fig. 5.5 se tiene en primer lugar que la solución numérica se aleja ligeramente de la solución exacta en el intervalo $[0,12]$ donde los errores relativos locales se encuentran por debajo del 6%. En segundo lugar, se observa que a partir de $x = 12$ la solución numérica comienza a tomar mejor precisión acercándose a la solución real, donde los errores relativos locales están por debajo de 1%. Por último, la solución numérica muestra que a la población de panteras le tomará aproximadamente 20 años alcanzar su capacidad límite en el refugio de 200 panteras. Aunque los resultados presentan una considerable incertidumbre en el intervalo $[0,12]$, los mismos pueden mejorar al elegir un valor más pequeño para h .

5.2 Métodos de Runge-Kutta

Los métodos de Runge-Kutta consisten en una serie de fórmulas que permiten obtener una solución numérica al PVI dado en la Ec. 5.1. Las fórmulas se desprenden a partir de la siguiente expresión general:

$$y_{i+1} = y_i + h \underbrace{(w_1 k_1, w_2 k_2 + w_n k_n)}_{\text{promedio ponderado}}, \quad x_{i+1} = x_i + h, \quad i = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (5.7)$$

donde la suma de los productos $w_i k_i$, $i = 0, 1, 2, 3 \dots n$, es un promedio ponderado de pendientes en el intervalo $x_i \leq x \leq x_{i+1}$. Los valores de w_i (con $i = 0, 1, 2, 3 \dots n$) son constantes y cada k_i (con $i = 0, 1, 2, 3 \dots n$) es la función f evaluada en un punto seleccionado (x, y) para el que $x_i \leq x \leq x_{i+1}$. El número n se llama orden del método. El promedio de la Ec. 5.7 no se forma a la fuerza, sin embargo, los parámetros se eligen de modo tal que la Ec.5.7 concuerde con el polinomio de Taylor de grado n (dado en la Ec.4.12) al intercambiar $a \rightarrow x_i$ y $x \rightarrow x_{i+1} + h$.

5.2.1 Fórmulas de Runge-Kutta

Lo que sigue son las fórmulas de Runge-Kutta de orden 1, orden 2, orden 3 y orden 4 respectivamente. Las demostraciones de las mismas se obtienen empleando métodos analíticos a partir de la Ec. 5.7 y las series de Taylor están fuera del alcance de este libro.

- Fórmula de Runge-Kutta de 1er orden:

$$y(x_{i+1}) = \underbrace{y_i + hf(x_i, y_i)}_{\text{Fórmula de Euler}} + \underbrace{O(h^2)}_{\text{E. Local}} ; \underbrace{O(h)}_{\text{E. Total}} \quad (5.8)$$

- Fórmulas de Runge-Kutta de 2do orden:

$$y(x_{i+1}) = \underbrace{y_i + (k_1 + k_2)h/2}_{\text{Fórmula de Euler mejorada}} + \underbrace{O(h^3)}_{\text{E. Local}} ; \underbrace{O(h^2)}_{\text{E. Total}} \quad (5.9)$$

$$k_1 = f(x_i, y_i) \quad y \quad k_2 = f(x_i + h, y_i + k_1 h) \quad (5.10)$$

- Fórmulas de Runge-Kutta de 3er orden:

$$y(x_{i+1}) = y_i + (k_1 + 4k_2 + k_3)h/6 + \underset{\text{E. Local}}{O(h^4)} ; \underset{\text{E. Total}}{O(h^3)} \quad (5.11)$$

$$k_1 = f(x_i, y_i), \quad k_2 = f(x_i + h/2, y_i + k_1 h/2) \text{ y}$$

$$k_3 = f(x_i + h/2, y_i - k_1 h + 2k_2 h) \quad (5.12)$$

- Fórmulas de Runge-Kutta de 4to orden:

$$y(x_{i+1}) = y_i + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6 + \underset{\text{E. Local}}{O(h^5)} ; \underset{\text{E. Total}}{O(h^4)} \quad (5.13)$$

$$k_1 = f(x_i, y_i), \quad k_2 = f(x_i + h/2, y_i + k_1 h/2)$$

$$k_3 = f(x_i + h/2, y_i + k_2 h/2) \text{ y } k_4 = f(x_i + h, y_i + k_3 h) \quad (5.14)$$

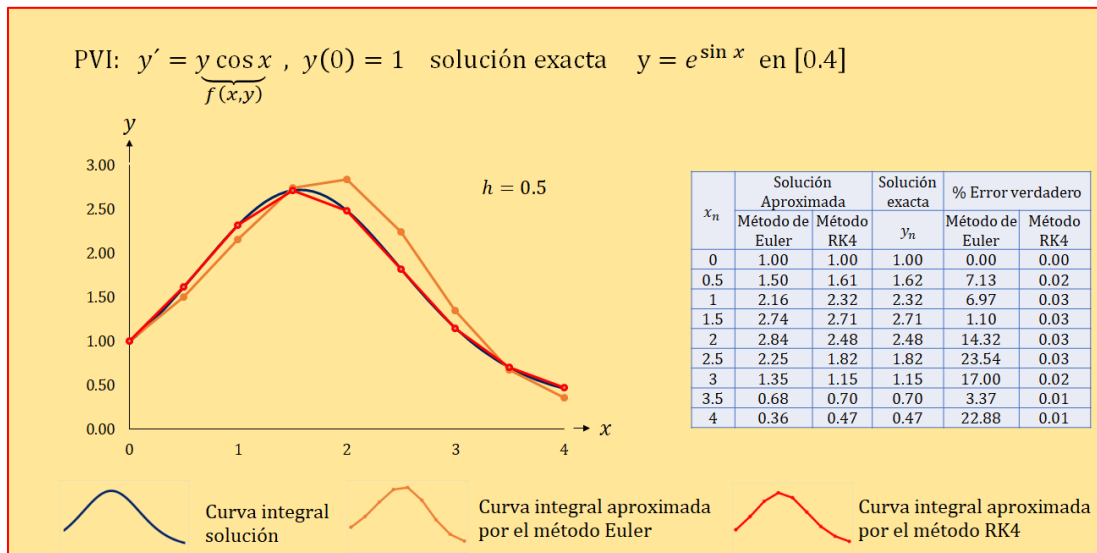


FIGURA 5.6. Comparación de los métodos de RK4 y de Euler.

Nótese que las k son relaciones de recurrencia. Es decir, k_1 aparece en la ecuación de k_2 , la cual aparece en la ecuación de k_3 , etcétera. Como cada k es una evaluación funcional, esta recurrencia vuelve eficientes a los métodos RK para cálculos en computadoras. Por otro lado, acorde a la Ec. 5.8. y Ec.5.9 se tiene que el método de

Runge Kutta de primer y segundo orden es de hecho el método de Euler y el método mejorado de Euler respectivamente. Cabe mencionar que el método de Runge Kutta de cuarto orden conocido como **método RK4** es un procedimiento muy usado y reconocido como una invaluable herramienta de cálculo debido a la alta precisión que proporcionan sus resultados. La Fig. 5.6 muestra la solución exacta y numérica por los métodos de Euler y RK4 con $h = 0.5$ para el PVI $y' = y \cos x$, $y(0) = 1$ en el intervalo $[0,4]$. Al comparar las soluciones se tiene que el error relativo en cada aproximación $y(x)$ con el método RK4 oscila entre el 0.01% y 0.03%, mostrando de esta manera la alta precisión y efectividad del método.

Ejemplo 5.2**Ecuación logística y especies en peligro**

Realizar el ejemplo 5.1 empleando el método de RK4.

Paso I: Identificar el problema matemático. Resolver numéricamente por el método de RK4 el siguiente PVI:

$$y'(t) = \ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{y}{200}\right) y, \quad y(0) = 25$$

Recuerde que la solución exacta es:

$$y(x) = \frac{200}{1 + 7e^{-\ln \sqrt{39/23} x}}$$

Paso II: Determinar la solución numérica empleando el método de RK4 con $h = 1$. Para ello se utilizarán las fórmulas dadas en la Ec. 5.13 y Ec. 5.14.

Partiendo de $i = 0$, $x_0 = 0$ e $y_0 = 25$

Cálculo de x_1

$$\begin{aligned} x_{0+1} &= x_0 + h \\ x_1 &= 0 + 1 \\ &= 1 \end{aligned}$$

Coeficiente k_1

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_0, y_0) \\ &= \ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{y_0}{200}\right) y_0 \end{aligned}$$

	$= \ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{25}{200}\right) 25$ $= 5.776$
Coeficiente k_2	$k_2 = f(x_0 + h/2, y_0 + k_1 h/2) = \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{y_0 + k_1 h/2}{200}\right] (y_0 + k_1 h/2)$ $= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{25 + (5.776)(1)/2}{200}\right] [25 + (5.776)(1)/2]$ $= 6.337$
Coeficiente k_3	$k_3 = f(x_0 + h/2, y_0 + k_2 h/2) = \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{y_0 + k_2 h/2}{200}\right] (y_0 + k_2 h/2)$ $= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{25 + (6.337)(1)/2}{200}\right] [25 + (6.337)(1)/2]$ $= 6.390$
Coeficiente k_4	$k_4 = f(x_0 + h, y_0 + k_3 h) = \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{y_0 + k_3 h}{200}\right] (y_0 + k_3 h)$ $= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{25 + (6.390)(1)}{200}\right] [25 + (6.390)(1)]$ $= 6.987$
Solución numérica en $x_1 = 1$	$y_{0+1} = y_0 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6$ $= 25 + [5.776 + 2(6.337) + 2(6.390) + 6.987] (1)/6$ $y_1 = 31.369$
Error relativo %. Recuerde que en $x_1 = 1$, el valor real es $y(1) = 31.369$	
$E_{\%} = \left \frac{31.369 - 31.369}{31.369} \right 100\% = 0.000\%$	
Continuado $i = 1$, $x_1 = 1$ e $y_1 = 31.369$	
Cálculo de x_2	Coeficiente k_1

$$\begin{aligned}x_{1+1} &= x_1 + h \\x_2 &= 1 + 1 \\&= 2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_1, y_1) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{y_1}{200}\right) y_1 \\&= \ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{31.369}{200}\right) 31.369 \\&= 6.983\end{aligned}$$

Coefficiente k_2

$$\begin{aligned}k_2 &= f(x_1 + h/2, y_1 + k_1 h/2) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{y_1 + k_1 h/2}{200}\right] (y_1 + k_1 h/2) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{31.396 + (6.983)(1)/2}{200}\right] [31.693 + (6.983)(1)/2] \\&= 7.600\end{aligned}$$

Coefficiente k_3

$$\begin{aligned}k_3 &= f(x_1 + h/2, y_1 + k_2 h/2) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{y_1 + k_2 h/2}{200}\right] (y_1 + k_2 h/2) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{31.396 + (7.600)(1)/2}{200}\right] [31.693 + (7.600)(1)/2] \\&= 7.653\end{aligned}$$

Coefficiente k_4

$$\begin{aligned}k_4 &= f(x_1 + h, y_1 + k_3 h) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{y_1 + k_3 h/2}{200}\right] (y_1 + k_3 h/2) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{31.396 + (7.653)(1)/2}{200}\right] [31.693 + (7.653)(1)/2] \\&= 8.293\end{aligned}$$

Solución numérica en $x_2 = 2$

$$\begin{aligned}y_{1+1} &= y_1 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6 \\&= 31.369 + [6.983 + 2(7.600) + 2(7.653) + 8.293] (1)/6 \\y_2 &= 39.000\end{aligned}$$

Error relativo %. Recuerde que en $x_2 = 2$, el valor real es $y(2) = 39.000$

$$E_{\%} = \left| \frac{39.000 - 39.000}{39.000} \right| 100\% = 0.001\%$$

Luego $i = 2$, $x_2 = 2$ e $y_2 = 39.000$

Cálculo de x_3

$$\begin{aligned}x_{2+1} &= x_2 + h \\x_3 &= 2 + 1 \\&= 3\end{aligned}$$

Coefficiente k_1

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_2, y_2) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{y_2}{200}\right) y_2 \\&= \ln \sqrt{39/23} \left(1 - \frac{39.000}{200}\right) 39.000 \\&= 8.289\end{aligned}$$

Coefficiente k_2

$$\begin{aligned}k_2 &= f(x_2 + h/2, y_2 + k_1 h/2) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{y_2 + k_1 h/2}{200}\right] (y_2 + k_1 h/2) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{39.000 + (8.289)(1)/2}{200}\right] [39.000 + (8.289)(1)/2] \\&= 8.934\end{aligned}$$

Coefficiente k_3

$$\begin{aligned}k_3 &= f(x_2 + h/2, y_2 + k_2 h/2) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{y_2 + k_2 h/2}{200}\right] (y_2 + k_2 h/2) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{39.000 + (8.934)(1)/2}{200}\right] [39.000 + (8.934)(1)/2] \\&= 8.982\end{aligned}$$

Coefficiente k_4

$$\begin{aligned}k_4 &= f(x_2 + h, y_2 + k_3 h) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{y_2 + k_3 h/2}{200}\right] (y_2 + k_3 h/2) \\&= \ln \sqrt{39/23} \left[1 - \frac{39.000 + (8.982)(1)/2}{200}\right] [39.000 + (8.982)(1)/2] \\&= 9.630\end{aligned}$$

Solución numérica en $x_3 = 3$

$$y_{2+1} = y_2 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6$$

$$= 39.000 + [8.289 + 2(8.934) + 2(8.982) + 9.630] (1)/6$$

$$y_3 = 47.958$$

Error relativo %. Recuerde que en $x_2 = 2$, el valor real es $y(2) = 39.000$

$$E\% = \left| \frac{39.000 - 39.000}{39.000} \right| 100\% = 0.001\%$$

Los resultados se muestran en la matriz de la Fig.5.6 al continuar el proceso de cálculo hasta $i = 20$.

Paso III: Hacer la representación gráfica. La Fig. 5.6 muestra las solución exacta y numérica con sus respectivas gráficas mediante una hoja de cálculo en Excel.

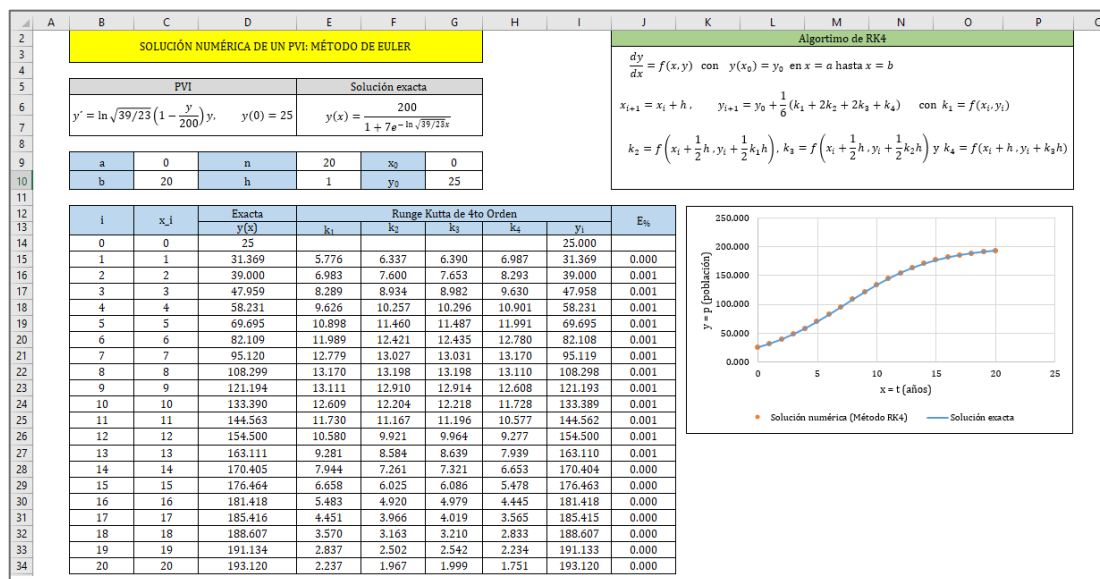


FIGURA 5.6. Comparación de la solución exacta y numérica con el método de RK4.

Conforme a los resultados y al gráfico de la Fig. 6.6., se tiene que la solución numérica converge a la solución exacta en todo el intervalo, donde los errores relativos locales se encuentran por debajo del 0.001%. Sin el uso de un computador e inclusive a nivel de programación, los cálculos de los coeficientes de RK4 pueden resultar tediosos y no triviales, sin embargo, se tiene una gran compensación en la alta precisión y exactitud de los resultados. Por último, se resalta que al igual que en el ejemplo 5.1 la solución numérica muestra que a la población de panteras le

tomará como mínimo 20 años alcanzar su capacidad límite en el refugio de 200 panteras.

5.3 Sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias

Considérese un sistema de ecuaciones diferenciales de la forma:

$$\begin{aligned} y_1' &= f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ y_2' &= f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ &\vdots \\ y_n' &= f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n). \end{aligned} \quad (5.15)$$

La solución de este sistema (con n variables dependientes en términos de una sola variable independiente x) requiere que se conozcan n condiciones iniciales en el valor de x . Particularmente para $n = 2$, fijando dos condiciones iniciales y haciendo convenientemente a $y_1 = x, y_2 = y, f_1 = f, f_2 = g$ y $x = t$, el sistema se reduce al siguiente problema de valores iniciales:

$$\begin{aligned} x' &= f(t, x, y), \quad x(t_0) = x_0 \\ y' &= g(t, x, y), \quad y(t_0) = y_0 \end{aligned} \quad (5.16)$$

que tiene como solución numérica por el método de Euler:

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + hf(t_i, x_i, y_i) \\ y_{i+1} &= y_i + hg(t_i, x_i, y_i) \end{aligned} \quad \text{con } t_{i+1} = t_i + h \quad (5.17)$$

y por el método RK4:

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + (m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4)h/6 \\ y_{i+1} &= y_i + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6 \end{aligned} \quad \text{con } t_{i+1} = t_i + h \quad (5.18)$$

Donde:

$$\begin{aligned}
 m_1 &= f(t_i, x_i, y_i) & k_1 &= g(t_i, x_i, y_i) \\
 m_2 &= f(t_i + h/2, x_i + m_1 h/2, y_i + k_1 h/2) & k_2 &= g(t_i + h/2, x_i + m_1 h/2, y_i + k_1 h/2) \\
 m_3 &= f(t_i + h/2, x_i + m_2 h/2, y_i + k_2 h/2) & k_3 &= g(t_i + h/2, x_i + m_2 h/2, y_i + k_2 h/2) \\
 m_4 &= f(t_i + h, x_i + m_3 h, y_i + k_3 h) & k_4 &= g(t_i + h, x_i + m_3 h, y_i + k_3 h) \quad (5.19)
 \end{aligned}$$

Nótese que las m y las k son relaciones de recurrencia inclusive entre ellas.

Por otro lado, un problema de valores iniciales de **segundo orden**

$$y'' = f(x, y, y'), \quad y(x_0) = y_0, \quad y'(x_0) = u_0 \quad (5.20)$$

se puede expresar como un problema con valores iniciales para un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden de dos ecuaciones. Si $y' = u$ el PVI dado en la Ec. 5.20 se convierte en el sistema:

$$\begin{aligned}
 y' &= u, & y(x_0) &= y_0 \\
 u' &= f(t, x, y), & u(x_0) &= u_0
 \end{aligned} \quad (5.21)$$

que tiene como solución numérica por el método de Euler:

$$\begin{aligned}
 y_{i+1} &= y_i + h u_i \\
 u_{i+1} &= u_i + h f(x_i, y_i, u_i)
 \end{aligned} \quad \text{con} \quad x_{i+1} = x_i + h \quad (5.22)$$

y por el método RK4:

$$\begin{aligned}
 y_{i+1} &= y_i + (m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4)h/6 \\
 u_{i+1} &= u_i + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6
 \end{aligned} \quad \text{con} \quad x_{i+1} = x_i + h \quad (5.23)$$

Donde:

$$\begin{aligned}
m_1 &= u_i & k_1 &= f(x_i, y_i, u_i) \\
m_2 &= u_i + hk_1/2 & k_2 &= f(x_i + h/2, y_i + m_1h/2, u_i + k_1h/2) \\
m_3 &= u_i + hk_2/2 & k_3 &= f(x_i + h/2, y_i + m_2h/2, u_i + k_2h/2) \\
m_4 &= u_i + hk_3 & k_4 &= f(x_i + h, y_i + m_3h, u_i + k_3h)
\end{aligned} \tag{5.24}$$

En general, se puede expresar cada ecuación diferencial de n –ésimo orden $y^{(n)} = f(x, y', y'', \dots, y^{(n-1)})$ como un sistema de n ecuaciones diferenciales de primer orden usando las sustituciones, $y = u_1, y' = u_2, y'' = u_3, \dots, y^{(n-1)} = u_n$.

Ejemplo 5.3

Contaminación radiactiva

Los ingenieros ambientales modelan diversos problemas que implican sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias. Uno de ellos es el modelo de cascada de decaimiento radiactivo el cual se utiliza en el estudio de la contaminación por radiación causada por la liberación de materiales radiactivos en el ambiente como resultado de accidentes industriales, por ejemplo, el caso Chernóbil y el caso Fukushima. Ahora bien, Si una sustancia X radiactiva se transforma por desintegración en otra sustancia Y , también radiactiva, la radioactividad de ambas sustancias viene dada por el siguiente PVI:

$$\begin{aligned}
x'(t) &= -\lambda_1 x, & x(t_0) &= x_0 \\
y'(t) &= \lambda_1 x - \lambda_2 y, & y(t_0) &= y_0
\end{aligned}$$

donde x = la cantidad de sustancia X (progenitora), y = cantidad de sustancia Y (generada), t = tiempo y λ_1 y λ_2 = constantes de desintegración de las sustancias X y Y respectivamente. Dados los parámetros $\lambda_1 = 1.2$, $\lambda_2 = 0.6$ y las condiciones iniciales $x = 1$ y $y = 0$ en $t = 0$: a) Obtener la solución numérica empleando el método de RK4 con $h = 0.5$ en el intervalo $[0, 10]$ y compararla con la solución exacta:

$$x(t) = e^{-1.2t}, \quad y(t) = 2(e^{-0.6t} - e^{-1.2t})$$

Y b) Graficar los resultados para visualizar cómo las variables dependientes varían con el tiempo.

Paso I: Identificar el problema matemático. Al reemplazar los valores $\lambda_1 = 1.2$, $\lambda_2 = 0.6$ y las condiciones iniciales $x = 1$ y $y = 0$ en $t = 0$ en el modelo de cascada el problema se resume a resolver numéricamente el siguiente PVI:

$$\begin{aligned} x' &= \underbrace{1.2x}_{f(t,x,y)}, & x(0) &= 1 \\ y' &= \underbrace{1.2x - 0.6y}_{g(t,x,y)}, & y(0) &= 0 \end{aligned}$$

Paso II: Determinar la solución numérica empleando el método de RK4 con $h = 0.5$. Para ello se utilizarán las fórmulas dadas en la Ec. 5.18 y Ec. 5.19.

Partiendo de $i = 0$, $t_0 = 0$, $x_0 = 1$ y $y_0 = 0$

Cálculo de t_1

$$t_{0+1} = t_0 + h = 0 + 0.5 \Rightarrow t_1 = 0.5$$

Coefficiente m_1

$$\begin{aligned} m_1 &= f(t_0, x_0, y_0) = -1.2x_0 \\ &= -1.2(1) \\ m_1 &= -1.2 \end{aligned}$$

Coefficiente k_1

$$\begin{aligned} k_1 &= g(t_0, x_0, y_0) = 1.2x_0 - 0.6y_0 \\ &= 1.2(1) - 0.6(0) \\ k_1 &= 1.2 \end{aligned}$$

Coefficiente m_2

$$\begin{aligned} m_2 &= f(t_0 + h/2, x_0 + m_1 h/2, y_0 + k_1 h/2) = -1.2(x_0 + m_1 h/2) \\ &= -1.2[(1) + (-1.2)(0.5)/2] \\ m_2 &= -0.840 \end{aligned}$$

Coefficiente k_2

$$k_2 = g(t_0 + h/2, x_0 + m_1 h/2, y_0 + k_1 h/2)$$

$$\begin{aligned}
 &= 1.2(x_0 + m_1 h/2) - 0.6(y_0 + k_1 h/2) \\
 &= 1.2[(1) + (1.2)(0.5)/2] - 0.6[(0) + (1.2)(0.5)/2] \\
 k_2 &= 0.660
 \end{aligned}$$

Coeficiente m_3

$$\begin{aligned}
 m_3 &= f(t_0 + h/2, x_0 + m_2 h/2, y_0 + k_2 h/2) = -1.2(x_0 + m_2 h/2) \\
 &= -1.2[(1) + (-0.840)(0.5)/2] \\
 m_3 &= -0.948
 \end{aligned}$$

Coeficiente k_3

$$\begin{aligned}
 k_3 &= g(t_0 + h/2, x_0 + m_2 h/2, y_0 + k_2 h/2) \\
 &= 1.2(x_0 + m_2 h/2) - 0.6(y_0 + k_2 h/2) \\
 &= 1.2[(1) + (-0.840)(0.5)/2] - 0.6[(0) + (0.660)(0.5)/2] \\
 k_3 &= 0.849
 \end{aligned}$$

Coeficiente m_4

$$\begin{aligned}
 m_4 &= f(t_0 + h, x_0 + m_3 h, y_0 + k_3 h) = -1.2(x_0 + m_3 h) \\
 &= -1.2[(1) + (-0.948)(0.5)] \\
 m_4 &= -0.631
 \end{aligned}$$

Coeficiente k_4

$$\begin{aligned}
 k_4 &= g(t_0 + h, x_0 + m_3 h, y_0 + k_3 h) = 1.2(x_0 + m_3 h) - 0.6(y_0 + k_3 h) \\
 &= 1.2[(1) + (-0.948)(0.5)] - 0.6[(0) + (0.849)(0.5)] \\
 k_4 &= 0.377
 \end{aligned}$$

Solución numérica en $t_1 = 0.5$

$$\begin{aligned}
 x_{0+1} &= x_0 + (m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4)h/6 \\
 &= 1 + [-1.200 + 2(-0.840) + 2(-0.948) + (-0.631)](0.5)/6 \\
 x_1 &= 0.549
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 y_{0+1} &= y_0 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6 \\
 &= 0 + [1.200 + 2(0.660) + 2(0.849) + (0.377)] (0.5)/6 \\
 y_1 &= 0.383
 \end{aligned}$$

Solución exacta en $t_1 = 0.5$

$$x(t) = e^{-1.2(0.5)} = 0.548, \quad y(t) = 2(e^{-0.6(0.5)} - e^{-1.2(0.5)}) = 0.384$$

Errores relativos

$$E_{x\%} = \left| \frac{0.548 - 0.549}{0.548} \right| = 0.107\% \quad y \quad E_{y\%} = \left| \frac{0.384 - 0.383}{0.384} \right| = 0.296\%$$

Continuando $i = 1$, $t_1 = 0.5$, $x_1 = 0.549$ y $y_0 = 0.383$

Cálculo de t_1

$$t_{1+1} = t_1 + h = 0.5 + 0.5 \Rightarrow t_2 = 1.0$$

Coficiente m_1

$$\begin{aligned}
 m_1 &= f(t_1, x_1, y_1) = -1.2x_1 \\
 &= -1.2(0.549) \\
 m_1 &= -0.659
 \end{aligned}$$

Coficiente k_1

$$\begin{aligned}
 k_1 &= g(t_1, x_1, y_1) = 1.2x_1 - 0.6y_1 \\
 &= 1.2(0.549) - 0.6(0.383) \\
 k_1 &= 0.430
 \end{aligned}$$

Coficiente m_2

$$\begin{aligned}
 m_2 &= f(t_1 + h/2, x_1 + m_1 h/2, y_1 + k_1 h/2) = -1.2(x_1 + m_1 h/2) \\
 &= -1.2[(0.549) + (-1.2)(0.5)/2] \\
 m_2 &= -0.461
 \end{aligned}$$

Coficiente k_2

$$\begin{aligned}
 k_2 &= g(t_1 + h/2, x_1 + m_1 h/2, y_1 + k_1 h/2) \\
 &= 1.2(x_1 + m_1 h/2) - 0.6(y_1 + k_1 h/2) \\
 &= 1.2[(0.549) + (-1.2)(0.5)/2] - 0.6[(0.383) + (1.2)(0.5)/2] \\
 k_2 &= 0.167
 \end{aligned}$$

Coeficiente m_3

$$\begin{aligned} m_3 &= f(t_1 + h/2, x_1 + m_2 h/2, y_1 + k_2 h/2) = -1.2(x_1 + m_2 h/2) \\ &= -1.2[(0.549) + (-0.461)(0.5)/2] \\ m_3 &= -0.521 \end{aligned}$$

Coeficiente k_3

$$\begin{aligned} k_3 &= g(t_1 + h/2, x_1 + m_2 h/2, y_1 + k_2 h/2) \\ &= 1.2(x_1 + m_2 h/2) - 0.6(y_1 + k_2 h/2) \\ &= 1.2[(0.549) + (-0.461)(0.5)/2] - 0.6[(0.383) + (0.167)(0.5)/2] \\ k_3 &= 0.266 \end{aligned}$$

Coeficiente m_4

$$\begin{aligned} m_4 &= f(t_1 + h, x_1 + m_3 h, y_1 + k_3 h) = -1.2(x_1 + m_3 h) \\ &= -1.2[(0.549) + (-0.521)(0.5)] \\ m_4 &= -0.347 \end{aligned}$$

Coeficiente k_4

$$\begin{aligned} k_4 &= g(t_1 + h, x_1 + m_3 h, y_1 + k_3 h) \\ &= 1.2(x_1 + m_3 h) - 0.6(y_1 + k_3 h) \\ &= 1.2[(0.549) + (-0.521)(0.5)] - 0.6[(0.383) + (0.266)(0.5)] \\ k_4 &= 0.037 \end{aligned}$$

Solución numérica en $t_1 = 1.0$

$$\begin{aligned} x_{1+1} &= x_1 + (m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4)h/6 \\ &= 0.549 + [-0.659 + 2(-0.461) + 2(-0.521) + (-0.347)](0.5)/6 \\ x_2 &= 0.302 \\ y_{1+1} &= y_1 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6 \\ &= 0.383 + [0.430 + 2(0.167) + 2(0.266) + (0.037)](0.5)/6 \\ y_2 &= 0.494 \end{aligned}$$

Solución exacta en $t_1 = 1.0$

$$x(t) = e^{-1.2(1.0)} = 0.301, \quad y(t) = 2(e^{-0.6(1.0)} - e^{-1.2(1.0)}) = 0.495$$

Errores relativos

$$E_{x\%} = \left| \frac{0.301 - 0.302}{0.301} \right| = 0.215\% \quad y \quad E_{y\%} = \left| \frac{0.495 - 0.494}{0.495} \right| = 0.249\%$$

Los resultados se muestran en la matriz de la Fig.5.7 al continuar el proceso de cálculo hasta $i = 20$.

Paso III: Hacer la representación gráfica. La Fig. 5.7 muestra la solución exacta y numérica con sus respectivas gráficas mediante una hoja de cálculo en Excel.

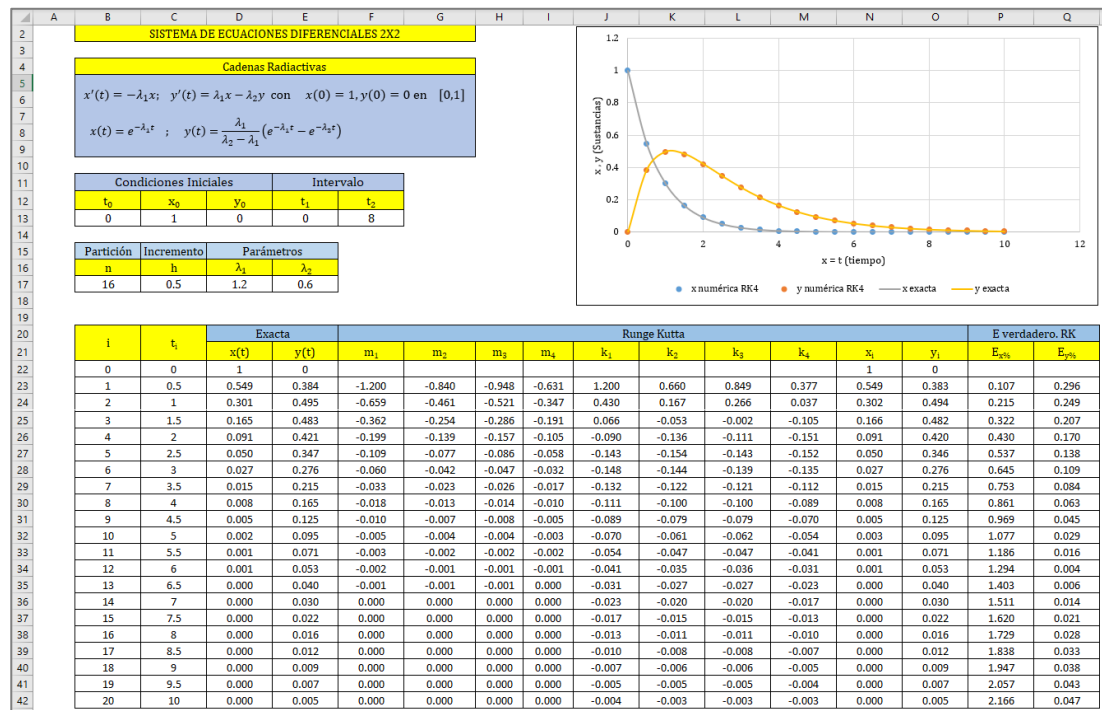


FIGURA 5.7. Solución exacta y numérica con el método de RK4 del sistema 2x2 mediante una hoja de cálculo Excel.

Conforme a los resultados y al gráfico de la Fig. 5.7, se tiene en primer lugar que la solución numérica para la radiactividad de la sustancia X se aleja ligeramente de la solución exacta en el intervalo $[0,10]$ donde los errores relativos locales se encuentran por debajo del 3%. No obstante, los resultados pueden mejorar al disminuir el tamaño de

h , sin embargo esto implicaría efectuar un mayor cálculo de iteraciones en el intervalo $[0,10]$. En segundo lugar se observa que los resultados de la solución numérica para la radiactividad de la sustancia Y presentan una mejor precisión, con errores relativos locales que se encuentran por debajo del 0.3%. Por último, se tiene que la radiactividad de la sustancia Y aumenta porque se produce más rápidamente de lo que se desintegra, aunque después de cierto tiempo la situación se invierte debido a que la actividad de la sustancia originaria (sustancia X) disminuye.

5.4 Solución numérica de un PVF de segundo orden

Considérese el siguiente problema de valor en la frontera (PVF):

$$\text{Resolver: } y'' = f(x, y, y') \quad \text{Sujeto a: } y(a) = y_0, \quad y(b) = y_1 \quad (5.25)$$

Los valores prescritos $y(a) = y_0$ y $y(b) = y_1$ se denominan **condiciones de frontera**. Una solución de un PVF (Ec. 5.25) es una función que satisface la ecuación diferencial en algún intervalo I (que contiene a a y b) cuya gráfica pasa por los puntos (a, y_0) y (b, y_1) tal y cómo muestra en la Fig. 5.8. De manera similar que en un PVI, los PVF poseen una desventaja y es que (en algunos casos) al emplear métodos analíticos no se pueden obtener soluciones exactas. Sin embargo, es posible obtener una solución aproximada empleando métodos numéricos. Tales métodos se presentan a continuación.

5.4.1 Método del disparo

El método del disparo consiste en convertir un PVF (dado en la Ec. 5.25) en un PVI equivalente al de la Ec. 5.21. Puesto que se desconocen las condiciones iniciales en la variable u , estas se fijan por tanteos $u_{01}, u_{02}, \dots, u_{0n}$, (de aquí el término **disparo**). Luego se resuelve el PVI para cada valor fijado utilizando preferiblemente el método de RK4 presentado en la Ec. 5.24. En el gráfico del lado izquierdo de la Fig. 6.8 se

ilustra una aproximación con tres disparos. En efecto, una forma de calcular el **disparo final exacto** en la variable u y que proporciona la mejor solución numérica al PVF es a través de la fórmula de interpolación de Newton en diferencia dividida. La de primer y segundo orden se presentan a continuación:

$$u_0 = u_{01} + b_1(y_1 - y_{01}) \quad (5.26)$$

$$u_0 = u_{01} + b_1(y_1 - y_{01}) + b_2(y_1 - y_{01})(y_1 - y_{02})$$

con las diferencias

$$b_1 = \frac{u_{02} - u_{01}}{y_{02} - y_{01}} \quad \text{y} \quad b_2 = \frac{[(u_{03} - u_{02})/(y_{03} - y_{02})] - [(u_{02} - u_{01})/(y_{02} - y_{01})]}{y_{03} - y_{01}} \quad (5.27)$$

donde el polinomio se forma con los valores de $u_{01}, u_{02}, \dots, u_{0n}$ tanteados, con los valores $y_{01}, y_{02}, \dots, y_{0n}$ en $x = b$ de cada solución y con la condición de frontera $y(b) = y_1$. No obstante, es poco probable que la aproximación de u por el polinomio de primer y segundo orden ofrezcan la respuesta exacta. En este sentido se necesitarán iteraciones y tanteos adicionales para formar un polinomio de orden superior que permita llegar al valor apropiado de u y así construir la solución.

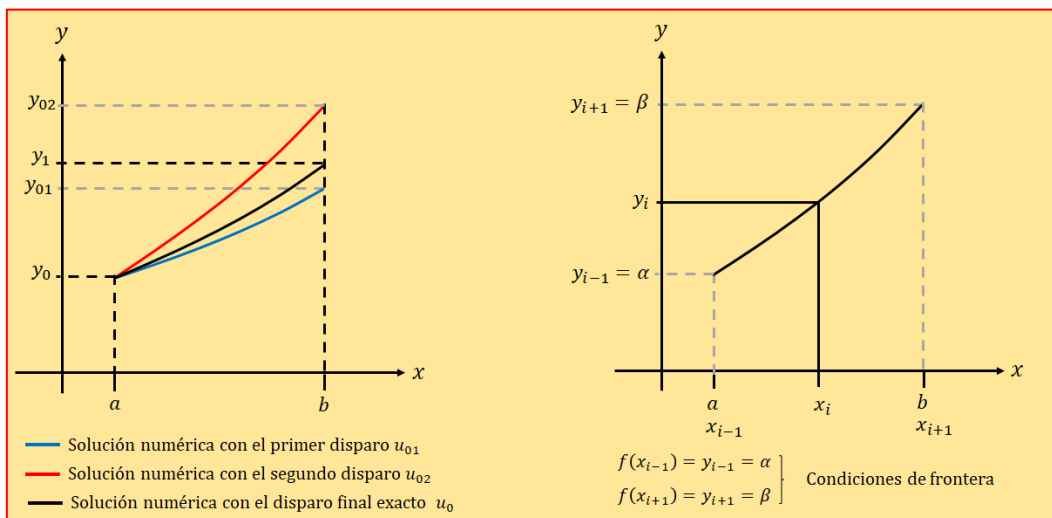


FIGURA 5.8. PVF: Método del disparo y método de diferencias finitas.

Ejemplo 5.4**Balance de concentración de un contaminante en estado estacionario**

La ecuación de advección-difusión tiene diversas aplicaciones en la ingeniería ambiental tales como: flujo de nutrientes, transporte de contaminantes en ríos o en la atmósfera. Para un contaminante que se propaga a lo largo de un río en una sola dirección, la ecuación toma la siguiente estructura:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - U \frac{\partial c}{\partial x}$$

donde c =concentración (mg/m^3), t =tiempo en (min), D =coeficiente de difusión (m^2/min) y x =distancia horizontal a lo largo del río (m), donde $x = 0$ es el punto en el que entra el contaminante y U = la velocidad del agua que fluye a través del río en la dirección x (m/min). Utilice el método del disparo para obtener una solución numérica con $h = 1$ en el estado estacionario, considerando que $D = 100, U = 1, c(0) = 100$ y $c(10) = 10$. Comparar la solución numérica con la solución exacta $c(x) = 955.7499 - 855.7499e^{x/100}$.

Paso I: Identificar el problema matemático. En el estado estacionario $(\partial c / \partial t) = 0$ al sustituir junto con los parámetros $D = 100$ y $U = 1$ en la ecuación de advección-difusión y tomando las condiciones de frontera $c(0) = 100$ y $c(10) = 10$, el problema se resume a resolver el siguiente PVF:

$$100 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{\partial c}{\partial x} = 0 ; \quad c(0) = 100, \quad c(10) = 10$$

Haciendo $c = y(x)$ y considerando que la ecuación diferencial solo depende de una sola variable, las derivadas parciales se reescriben como derivadas ordinarias, así pues:

$$100y'' - y' = 0 ; \quad y(0) = 100, \quad y(10) = 10$$

El PVF tiene solución exacta que es $y(x) = 955.7499 - 855.7499e^{x/100}$. Ahora bien, como se pide obtener una solución numérica por el método del disparo se efectúa el cambio $y' = u$, por consiguiente, el PVF se convierte en el PVI:

$$\begin{aligned} y' &= u, & y(0) &= 100 \\ u' &= \frac{u}{100}, & u(0) &= u_0 \\ &f(x,y,u) \end{aligned}$$

Paso II: Inicialmente se propone un primer valor inicial para u (**disparo 1**), por tanteos este sería $u_0 = -9$. Para la solución numérica por el método RK4 y con $h = 2$, emplear las fórmulas dadas en la Ec. 5.23 y Ec. 5.24.

Partiendo de $i = 0$, $x_0 = 0$, $y_0 = 100$ y $u_{01} = -9$

Cálculo de x_1

$$x_{0+1} = x_0 + h = 0 + 2 \Rightarrow x_1 = 2$$

<p>Coeficiente m_1</p> $m_1 = u_0 = -9$	<p>Coeficiente k_1</p> $k_1 = f(x_0, y_0, u_0) = u_0/100 = -9/100$ $k_1 = -0.090$
<p>Coeficiente m_2</p> $m_2 = u_0 + hk_1/2$ $= -9 + 2(-0.090)/2$ $= -9.090$	<p>Coeficiente k_2</p> $k_2 = f(x_0 + h/2, y_0 + m_1 h/2, u_0 + k_1 h/2)$ $= (u_0 + hk_1/2)/100$ $= [-9 + 2(-0.090)/2]/100$ $= -0.091$
<p>Coeficiente m_3</p> $m_3 = u_0 + hk_2/2$ $= -9 + 2(-0.091)/2$ $= -9.091$	<p>Coeficiente k_3</p> $k_3 = f(x_0 + h/2, y_0 + m_2 h/2, u_0 + k_2 h/2)$ $= (u_0 + hk_2/2)/100$ $= [-9 + 2(-0.091)/2]/100$

$= -0.091$	
<p>Coeficiente m_4</p> $m_4 = u_0 + hk_3$ $= -9 + 2(-0.091)$ $= -9.182$	<p>Coeficiente k_4</p> $k_4 = f(x_0 + h, y_0 + m_3h, u_0 + k_3h)$ $= (u_0 + hk_3)/100$ $= [-9 + 2(-0.091)]/100$ $= -0.092$
<p>Solución numérica en $x_1 = 2$</p> $y_{0+1} = y_0 + (m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4)h/6$ $= 100 + [-9.000 + 2(-9.090) + 2(-9.091) + (-9.182)](2)/6$ $y_1 = 88.819$ $u_{0+1} = u_0 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6$ $= -9 + [-0.090 + 2(-0.091) + 2(-0.091) + (-0.092)](2)/6$ $u_1 = -9.182$	
<p>Continuando $i = 1$, $x_1 = 2$, $y_1 = 100$ y $u_1 = -9.182$</p> <p>Cálculo de x_2</p> $x_{1+1} = x_1 + h = 2 + 2 \Rightarrow x_2 = 4$	
<p>Coeficiente m_1</p> $m_1 = u_1 = -9.182$	<p>Coeficiente k_1</p> $k_1 = f(t_1, x_1, y_1) = u_1/100 = -9.182/100$ $k_1 = -0.092$
<p>Coeficiente m_2</p> $m_2 = u_1 + hk_1/2$ $= -9.182 + 2(-0.092)/2$ $= -9.274$	<p>Coeficiente k_2</p> $k_2 = f(x_1 + h/2, y_1 + m_1 h/2, u_1 + k_1 h/2)$ $= (u_1 + hk_1/2)/100$ $= [-9.182 + 2(-0.092)/2]/100$

	$= -0.093$
<p>Coeficiente m_3</p> $m_3 = u_1 + hk_2/2$ $= -9.182 + 2(-0.093)/2$ $= -9.275$	<p>Coeficiente k_3</p> $k_3 = f(x_1 + h/2, y_1 + m_2 h/2, u_1 + k_2 h/2)$ $= (u_1 + hk_2/2)/100$ $= [-9.182 + 2(-0.093)/2]/100$ $= -0.093$
<p>Coeficiente m_4</p> $m_4 = u_1 + hk_3$ $= -9.182 + 2(-0.093)$ $= -9.367$	<p>Coeficiente k_4</p> $k_4 = f(x_1 + h, y_1 + m_3 h, u_1 + k_3 h)$ $= (u_1 + hk_3)/100$ $= [-9.182 + 2(-0.093)]/100$ $= -0.094$
<p>Solución numérica en $x_1 = 2$</p> $y_{1+1} = y_1 + (m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4)h/6$ $= 81.819 + [-9.182 + 2(-9.274) + 2(-9.275) + (-9.367)](2)/6$ $y_2 = 63.270$ $u_{1+1} = u_1 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6$ $= -9.182 + [-0.092 + 2(-0.093) + 2(-0.093) + (-0.094)](2)/6$ $u_2 = -9.367$	
<p>Obsérvese que la primera matriz de la Fig 5.9 muestra los resultados previos que se obtienen siguiendo el proceso del cálculo hasta $x_5 = 10, i = 5$.</p> <p>Asimismo, se propone un segundo valor inicial para u (disparo 2) con $u_0 = -8$. La segunda matriz de la Fig. 5.9 muestra los resultados producto de desarrollar los mismos procedimientos del disparo 1.</p> <p>Finalmente, se calcula el disparo final. Para ello, se toman los disparos iniciales $u_{01} = -9$ y $u_{02} = -8$, los valores de y en cada disparo justo en la frontera, $x = 10$, $y_{01} = 5.346$ y $y_{02} = 15.863$ y la condición de frontera $y(10) = 10$. Así pues, al sustituir en la</p>	

fórmula de interpolación lineal (Ec. 5.26) y la diferencia de primer orden en la Ec.5.27 se tiene que el disparo final es:

$$u_0 = -9 + (10 - 5.346) \frac{-8 - (-9)}{15.863 - 5.346} = -8.557$$

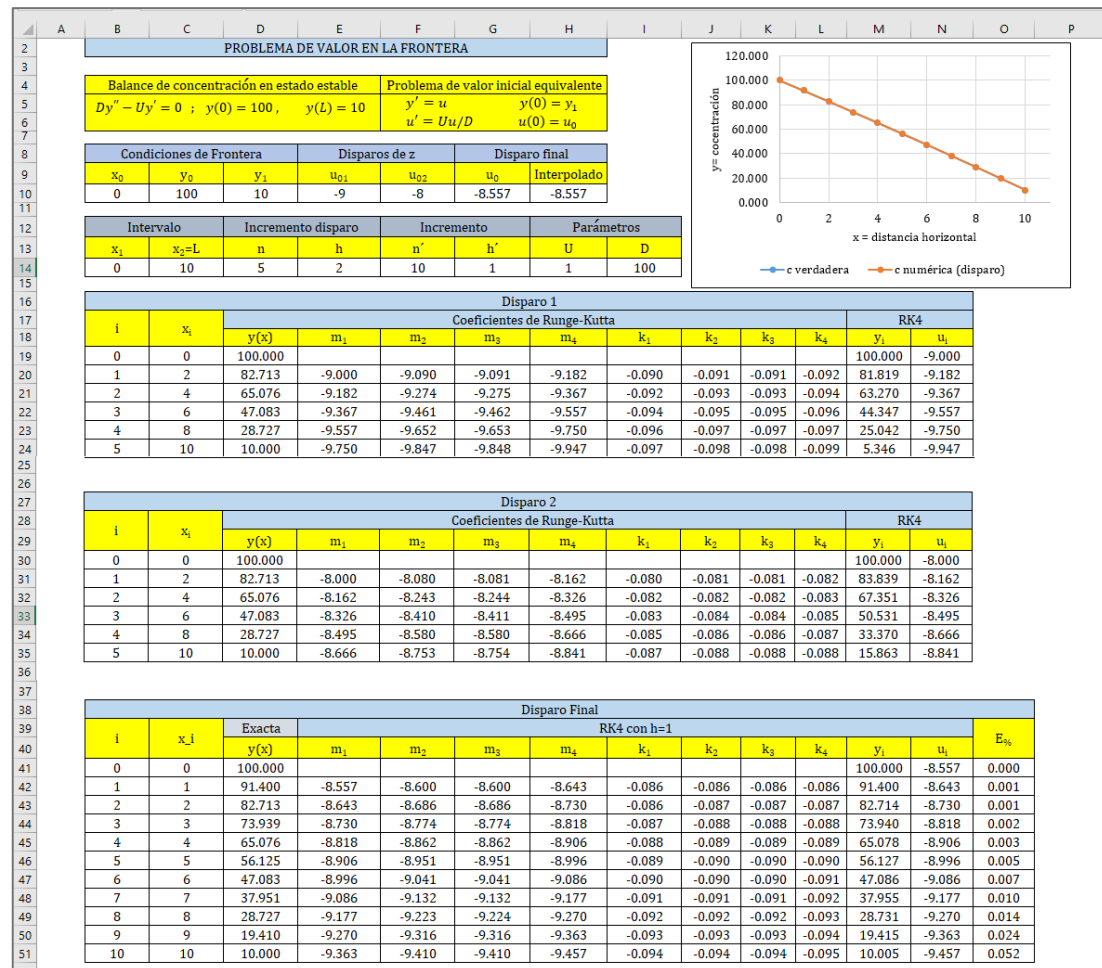


FIGURA 5.9. Solución exacta y numérica del PVF con el método del disparo en una hoja de cálculo Excel.

En efecto, la solución numérica al PVF se construye tomando como valor inicial el **disparo final** ($u_0 = -8.557$). Los resultados se muestran en la tercera matriz de la Fig. 5.9 y se obtienen al aplicar el método RK4 con $h = 1$.

Paso III: Hacer la representación gráfica. La curva integral de la solución se muestra en el gráfico de la Fig. 5.9. Conforme a los resultados se tiene que la solución numérica converge a la solución exacta en todo el intervalo, donde los errores relativos locales se encuentran por debajo del 0.05%. Aunque la efectividad del método del disparo depende fuertemente de la elección de los disparos, para la aplicación del mismo se recomienda el uso de ordenadores que permitan variar los disparos. Por último, se tiene que la concentración del contaminante $c(x)$, en estado estacionario, río abajo x va disminuyendo.

5.4.2 Método de diferencias finitas

El método de diferencias finitas consiste en sustituir las derivadas del PVF por diferencias divididas finitas. En este sentido, considérese el siguiente PVF de segundo orden de tipo lineal:

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = f(x), \quad y(a) = \alpha, y(b) = \beta \quad (5.28)$$

y las diferencias finitas de primer y segundo orden centradas:

$$y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \quad \text{y} \quad y''(x_i) = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}. \quad (5.29)$$

Al sustituir las diferencias de la Ec 5.29. en las derivadas del PVF de Ec.5.28. resulta:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + p(x_i) \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + q(x_i)y_i = f(x_i), \quad (5.30)$$

La discretización es producto de particionar el intervalo $[a, b]$ en **puntos de malla interiores** regulares $a = x_0 < x_1 < x_2, \dots, x_{n-1} < x_n = b$, es decir,

$$x_i = a + ih, \quad \text{donde } i = 0, 1, 2, \dots, n \quad \text{y} \quad h = (b - a)/n. \quad (5.31)$$

Al agrupar términos de la Ec. 5.30 se desprende:

$$\left(1 + \frac{h}{2}p_i\right)y_{i+1} + (h^2q_i - 2)y_i + \left(1 - \frac{h}{2}p_i\right)y_{i-1} = h^2f_i. \quad (5.31)$$

Esta ecuación se conoce como **ecuación de diferencias finitas** y es una aproximación del PVF dado en la Ec. 5.29, en la cual tanto el primer valor como el último, y_{i-1} y y_{i+1} respectivamente, se especifican por las condiciones de frontera (ver gráfico del lado derecho de la Fig. 5.8). Así pues, si i toma los valores $1, 2, \dots, n - 1$, se obtienen $n - 1$ ecuaciones con $n - 1$ incógnitas y_1, y_2, \dots, y_{n-1} , donde la solución del mismo proporciona la solución numérica $y(x_i)$ en los puntos de malla interiores x_1, x_2, \dots, x_{i-1} del intervalo $[a, b]$.

Ejemplo 5.5

Balance de concentración de un contaminante en estado estacionario

Realizar el ejemplo 6.4 empleando el método de diferencias finitas.

Paso I: Identificar el problema matemático. Resolver el siguiente PVF:

$$100y'' - y' = 0 ; \quad y(0) = 100, \quad y(10) = 10$$

Reescribir la ecuación en forma canónica*, multiplicando toda la ED por $(1/100)$

$$y'' - \frac{1}{100}y' = 0 ; \quad y(0) = 100, \quad y(10) = 10$$

siendo $p(x) = -1/100$, $q(x) = 0$ y $f(x) = 0$. Así la ecuación en diferencias finitas Ec.6.31 se reduce a:

$$\left(1 - \frac{h}{200}\right)y_{i+1} - 2y_i + \left(1 + \frac{h}{200}\right)y_{i-1} = 0$$

Paso II: Calcular mediante la Ec. 6.26 la localización x_i de los puntos interiores en $[0,10]$ con $h = 1$ desde $i = 0$ hasta 10. Dado que $a = 0$ y $b = 10$ se desprenden:

$$x_0 = \underbrace{0}_a, \quad x_1 = 1, \quad x_2 = 2, \quad x_3 = 3, \quad x_4 = 4, \quad x_5 = 5$$

$$x_6 = 6, \quad x_7 = 7, \quad x_8 = 8, \quad x_9 = 0, \quad x_{10} = \underbrace{10}_b.$$

Paso III: Desarrollar la ecuación de diferencias finitas con $h = 1$ desde $i = 1$ hasta $i = 10 - 1 = 9$, donde $y_0 = 100$ y $y_{10} = 10$

$$i = 1 \Rightarrow \left(1 - \frac{1}{200}\right)y_2 - 2y_1 + \left(1 + \frac{1}{200}\right)y_0 = 0$$

$$-2y_1 + \frac{199}{200}y_2 = -\frac{201}{2} \rightarrow \text{Ecuación 1}$$

$$i = 2 \Rightarrow \left(1 - \frac{1}{200}\right)y_3 - 2y_2 + \left(1 + \frac{1}{200}\right)y_1 = 0$$

$$\frac{201}{200}y_1 - 2y_2 + \frac{199}{200}y_3 = 0 \rightarrow \text{Ecuación 2}$$

$$i = 3 \Rightarrow \left(1 - \frac{1}{200}\right)y_4 - 2y_3 + \left(1 + \frac{1}{200}\right)y_2 = 0$$

$$\frac{201}{200}y_2 - 2y_3 + \frac{199}{200}y_4 = 0 \rightarrow \text{Ecuación 3}$$

Tomando las 3 ecuaciones anteriores y siguiendo el proceso de iteración hasta $i = 9$ se genera el siguiente sistema de 9 ecuaciones con 9 incógnitas:

$$\begin{aligned} -2y_1 + 199y_2/200 + 0y_3 + 0y_4 + 0y_5 + 0y_6 + 0y_7 + 0y_8 + 0y_9 &= -201/2 \\ 201y_1/200 - 2y_2 + 199y_3/200 + 0y_4 + 0y_5 + 0y_6 + 0y_7 + 0y_8 + 0y_9 &= 0 \\ 0y_1 + 201y_2/200 - 2y_3 + 199y_4/200 + 0y_5 + 0y_6 + 0y_7 + 0y_8 + 0y_9 &= 0 \\ 0y_1 + 0y_2 + 201y_3/200 - 2y_4 + 199y_5/200 + 0y_6 + 0y_7 + 0y_8 + 0y_9 &= 0 \\ 0y_1 + 0y_2 + 0y_3 + 201y_4/200 - 2y_5 + 199y_6/200 + 0y_7 + 0y_8 + 0y_9 &= 0 \\ 0y_1 + 0y_2 + 0y_3 + 0y_4 + 201y_5/200 - 2y_6 + 199y_7/200 + 0y_8 + 0y_9 &= 0 \\ 0y_1 + 0y_2 + 0y_3 + 0y_4 + 0y_5 + 201y_6/200 - 2y_7 + 199y_8/200 + 0y_9 &= 0 \\ 0y_1 + 0y_2 + 0y_3 + 0y_4 + 0y_5 + 0y_6 + 201y_7/200 - 2y_8 + 199y_9/200 &= 0 \\ 0y_1 + 0y_2 + 0y_3 + 0y_4 + 0y_5 + 0y_6 + 0y_7 + 201y_8/200 - 2y_9 &= -199/20 \end{aligned}$$

El sistema tiene como solución (**ver Ap. A**)

$$y_1 = 91.400, \quad y_2 = 81.713, \quad y_3 = 73.939, \quad y_4 = 65.076, \quad y_5 = 56.125$$

$$y_6 = 47.083, \quad y_7 = 37.951, \quad y_8 = 28.727, \quad y_9 = 19.410.$$

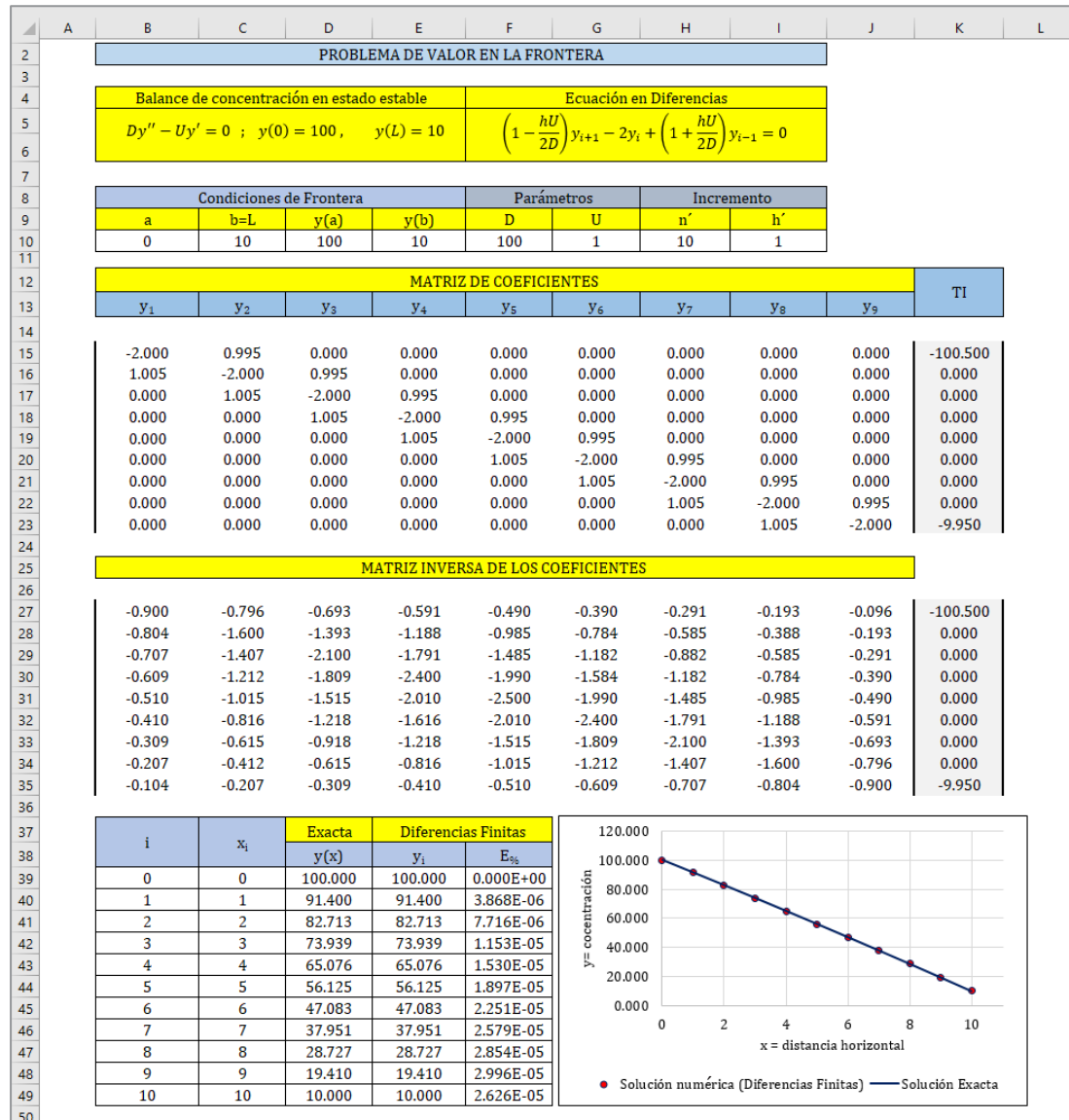


FIGURA 5.10. Solución exacta y numérica del PVP con el método de diferencias finitas en una hoja de cálculo Excel.

Paso IV: Hacer la representación gráfica. La Fig. 5.10 muestra la solución numérica por diferencias finitas, donde la solución del sistema de obtiene insertando el método de la matriz inversa en una hoja de cálculo Excel (**ver Ap. A**). Asimismo, se compara la solución numérica con la solución exacta. Conforme a los resultados se tiene que la solución

numérica converge a la solución exacta en todo el intervalo, donde los errores relativos locales se encuentran por debajo del $10^{-5}\%$. La precisión de las aproximaciones se puede mejorar si se usa un valor más pequeño de h , sin embargo, esto requiere resolver un sistema más elevado de ecuaciones. En efecto, se recomienda utilizar hojas de cálculo u otras herramientas informáticas para resolver tales sistemas. Por último, es de resaltar que el método del disparo y el método de diferencias finitas funcionan bastante bien en el presente caso. No obstante, el método de diferencias finitas es de gran utilidad debido a la facilidad con la que se puede extender a casos más complicados.

5.5 Ejercicio de aplicación: Dinámica de población depredador - presa

En esta sección se procederá a resolver numéricamente las ecuaciones de Lotka-Volterra empleando una hoja de cálculo Excel.

Ejemplo 5.6

Dinámica de población depredador - Presa

En la ingeniería ambiental las ecuaciones de Lotka-Volterra se emplean para estudiar la dinámica poblacional de dos especies de animales que interactúan dentro del mismo ambiente o ecosistema, donde se parte de la hipótesis que la primera especie (presa) se alimenta solo de vegetación y la segunda (depredador) se alimenta solo de la primera especie. El modelo de Lotka-Volterra tiene la siguiente estructura:

$$x'(t) = ax - bxy, \quad y'(t) = dxy - cy$$

donde $x(t)$ y $y(t)$ representan el número de presas y depredadores respectivamente, a =razón de crecimiento de la presa, c = razón de muerte del depredador y b y d = la razón que caracteriza el efecto de la interacción depredador-presa sobre la muerte de la presa y el crecimiento del depredador respectivamente. Los términos xy que se multiplican hacen que el modelo sea no lineal. Dados los parámetros $a = 1.2$, $b = 0.6$, $c = 0.8$, $d = 0.3$ y los valores iniciales $x = 2$ y $y = 1$ en $t = 0$: a) insertar en una hoja de cálculo Excel el método RK4 con $h = 0.1$ para obtener una solución numérica al modelo de Lotka-

Volterra desde $t = 0$ hasta 30, b) hacer las gráficas $y = f(t)$, $x = g(t)$ y $y = f(x)$ y c) comentar los resultados.

Paso I: Problema matemático. Al sustituir en las ecuaciones de Lotka-Volterra, los parámetros $a = 1.2, b = 0.6, c = 0.8$ y $d = 0.3$ y tomando los valores iniciales $x = 2$ y $y = 1$ en $t = 0$, el problema se simplifica al siguiente PVI:

$$\begin{aligned}x'(t) &= 1.2x - 0.6xy, & x(0) &= 2 \\y'(t) &= 0.3xy - 0.8y, & y(0) &= 1\end{aligned}$$

Paso II: Personalizar la hoja de cálculo para obtener a $x(t)$ y $y(t)$. La Fig. 5.11 muestra que el cálculo corresponde desde $i = 0$ hasta $i = 1000$. De aquí la gran utilidad que proporcionan las herramientas informáticas puesto que permiten realizar un gran número de cálculos además de representar de forma ilustrativa el comportamiento del sistema cuando se varían los parámetros y las condiciones iniciales.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
2		Sistema de ecuaciones diferenciales Acopladas: RK 4to Orden. Modelo de Lotka-Volterra								$x'(t) = f(t, x, y)$ con $x(0) = x_0$	$m_1 = hf(t_1, x_1, y_1)$			
3											$m_2 = hf(t_1 + \frac{1}{2}h, x_1 + \frac{1}{2}m_1, y_1 + \frac{1}{2}k_1)$			
4										$y'(t) = g(t, x, y)$ con $y(0) = y_0$	$m_3 = hf(t_1 + \frac{1}{2}h, x_1 + \frac{1}{2}m_1, y_1 + \frac{1}{2}k_1)$			
5											$m_4 = hf(t_1 + h, x_1 + m_3, y_1 + k_3)$			
6														
7										$t_{i+1} = t_i + h$				
8														
9														
10														
11														
12														
13														
14														
15														
16														
17														
18														
19														
20														

FIGURA 5.11. Modelo de Lotka-Volterra personalizado en Excel.

Paso III: Insertar el algoritmo de RK4 para ecuaciones acopladas tal y como muestra la Fig. 5.12. Los coeficientes de Runge-Kutta deben insertarse de forma secuencial. Primero se introduce la fórmula para m_1 , seguidamente se introduce la fórmula para k_1 , luego se introduce la fórmula para m_2 y posteriormente la fórmula de k_2 . Este procedimiento se repite sucesivamente hasta introducir el último término k_4 .

Paso IV: Emplear la opción de arrastre de celda en Excel y terminar el cálculo (Fig.5.13).

Paso V: Gráficas $y = f(t)$, $x = g(t)$ y $y = f(x)$.

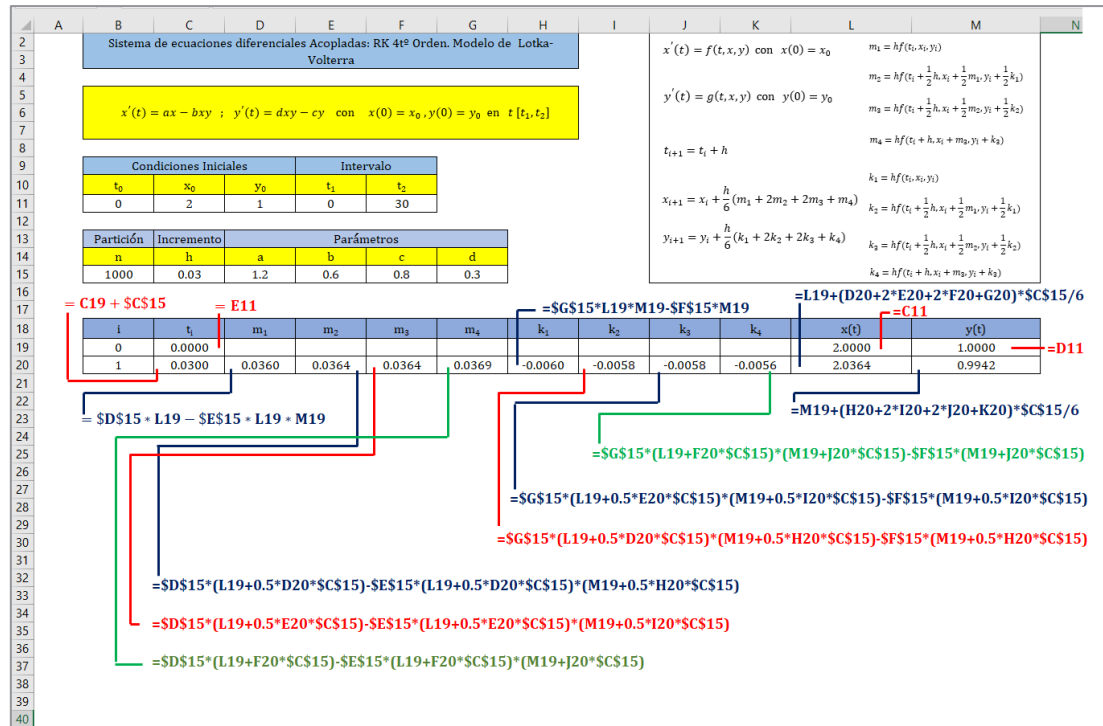


FIGURA 5.12. Método RK4 para el modelo Lotka- Volterra en Excel.

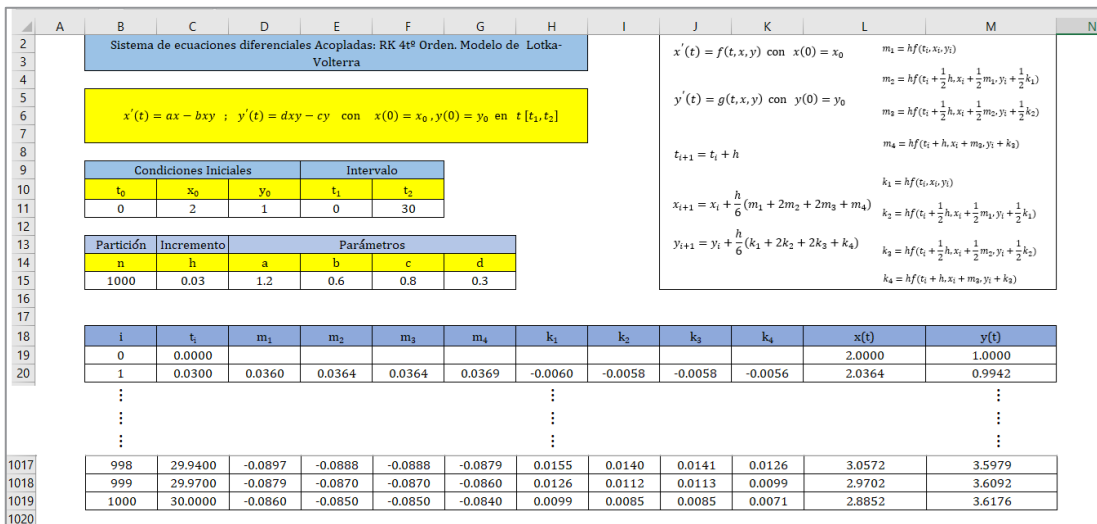


FIGURA 5.13. Cálculo numérico con el método RK4 en Excel

El gráfico del lado izquierdo de la Fig. 5.14 muestra las soluciones numéricas usando el método RK4 con un paso $h = 0.1$. En primer lugar, se aprecia un patrón cíclico con una cantidad pequeña de depredadores y un aumento exponencial en el número de presas. En

segundo lugar y para un tiempo determinado, las presas son tan numerosas que la población de depredadores empieza a crecer. En efecto, el incremento del número de depredadores causa que las presas disminuyan y esto a su vez conlleva a una disminución de los depredadores. Este comportamiento se presenta de forma periódica. En tercer lugar, se tiene que el pico de la curva para el depredador se retrasa con respecto al de la presa. Finalmente, el gráfico del lado derecho de la Fig. 5.13 muestra una representación del estado-espacio donde se observa que la interacción entre el depredador y la presa define una órbita cerrada en sentido derecho.

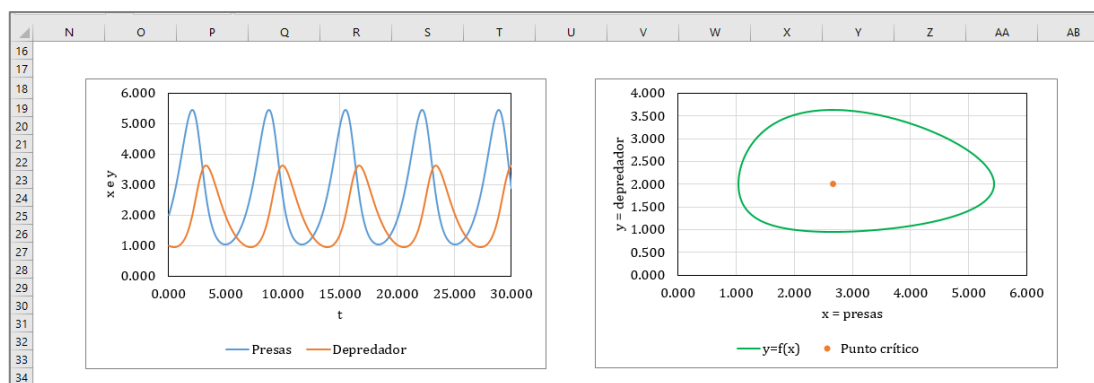


FIGURA 5.14. Solución numérica $x(t)$ y $y(t)$ con RK4 con $h = 0.1$ y representación del estado-espacio $y = f(x)$.

5.6 Ejercicios propuestos

Observación:

- Resolver cada uno de los ejercicios planteados haciendo uso de la hoja de cálculo Excel.
- Construir las matrices numéricas correspondientes a cada método.
- Insertar las celdas con los parámetros dados en cada modelo.
- Representar gráficamente las soluciones numéricas.

1.- Para simular la población se emplea el modelo logístico dado por el siguiente PVI:

$$p'(t) = k_{gm}(1 - p/p_{\max})p ; \quad p(t_0) = p_0$$

donde p =población, k_{gm} =tasa máxima de crecimiento con condiciones ilimitadas y p_{max} =capacidad de carga. Dada la condición inicial $p(1950) = 2555$ millones y los parámetros $k_{gm} = 0.026/\text{año}$ y $p_{max} = 12000$ millones:

- Simular la población mundial entre 1950 y 2000, con el empleo de cualesquiera de las fórmulas de Runge-Kutta.
- Comparar los resultados con la siguiente solución exacta:

$$p(t) = \frac{p_{max}}{1 + [(p_{max}/p_0) - 1]e^{-k_{gm}(x-x_0)}}$$

Calcular el error verdadero, ¿Porque discrepancia en los resultados? y ¿cómo puede mejorarse?

- Hacer que la función genere salidas que correspondan a las fechas de los siguientes datos:



Cruce de Shibuya, Tokio. La superpoblación es uno de los grandes retos a los que se enfrenta la humanidad. Desde la década de 1950 (principalmente debido a los avances médicos y al aumento de la productividad agrícola) el número de personas que hay en la tierra se ha ido incrementando a cada vez más velocidad. En la actualidad hay aproximadamente 7.700 millones de seres humanos pero según las proyecciones de la ONU esta cifra podría alcanzar los 9.800 millones para 2050 y superar ampliamente los 11.000 millones para final de siglo. Sin embargo, un estudio que publica el prestigioso medio científico *The Lancet*, apunta que las Naciones Unidas podrían estar equivocadas en sus predicciones. Según las investigaciones del Instituto de Métricas y Evaluaciones de Salud (IHME) de la Universidad de Washington, la humanidad alcanzará su pico de población en la década de 2060 con 9.700 millones. Pero a partir de ese momento el ciclo demográfico cambiará y el número de personas en el planeta se irá reduciendo lentamente hasta quedarse en los 8.800 millones en 2100. **Fotografía:** El Ágora diario del agua.

Año	1950	1960	1970	1980	1990	2000
Población	2555	3040	3708	4454	5276	6079

- Desarrollar la gráfica de la simulación junto con los datos presentados.

2.-Los ingenieros ambientales aplican balances de masa al estudio de la dinámica de población en organismos vivos. Considere el caso de la comunidad de algas o bacterias de un lago o de un río, o la comunidad de microorganismos en un sistema de tratamiento de desperdicios. El balanceo de masa de la biomasa viene modelado por el PVI:

$$Vc'(t) = Qc_{entra} - Qc \pm \text{reacción} ; c(t_0) = c_0$$

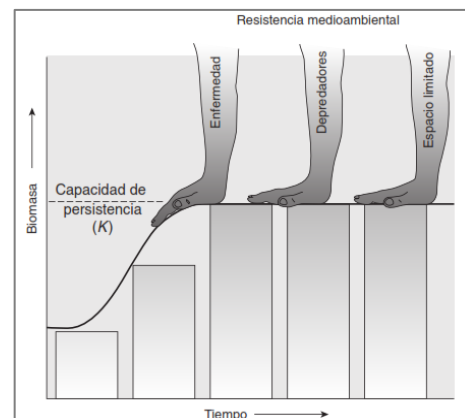
donde V =volumen (m^3), c = concentración o biomasa (mg/m^3), t =tiempo (segundos, minutos e inclusive hasta años), Qc_e =tasa de alimentación (g/min), Q = flujo (m^3/min) y el miembro de la ecuación llamada reacción se refiere a todos los procesos cinéticos que median el crecimiento o la muerte de los organismos. Dado un volumen de $12m^3$, una tasa de alimentación de $175 g/min$, un flujo de $1 m^3/min$ y una tasa de reacción de segundo orden $-kVc^2$ con $k = 0.15 m^3/g/min$

- Utilizar el método de Euler mejorado con un paso de $h = 0.5$ para resolver el PVI hasta que la concentración alcance un nivel estable. Tome como condición inicial $c(0) = 0$.
- Encontrar un rango de condiciones iniciales de modo que se obtenga una trayectoria muy diferente de la que se obtuvo con $c(0) = 0$. Relacione sus resultados con las soluciones de estado estable.
- Investigar las aplicaciones de la ecuación de balance de masa en la ingeniería ambiental.

3.- En la ingeniería ambiental se emplea el siguiente PVI:

$$s'(t) = (\mu_{\max} - k_d) \left(1 - \frac{s}{K}\right) s \quad ; \quad s(t_0) = s_0$$

para modelar el crecimiento logístico de una población bajo el efecto de capacidad de persistencia de un ecosistema. Los términos, en el modelo corresponden a $s'(t)$ =razón de crecimiento de biomasa en función del tiempo, s =cantidad de biomasa ($mg DW/L$), t =tiempo (segundo, minutos e inclusive hasta años), μ_{\max} =coeficiente de crecimiento específico máximo ($1/día$), k_d =coeficiente de respiración ($1/día$), K =capacidad de persistencia ($mg DW/L$) y s_0 = biomasa inicial ($mg DW/L$).



Efecto de la capacidad de persistencia. Según el modelo de crecimiento logístico, la resistencia medioambiental (representada por la presión que ejerce la mano hacia abajo) reduce la tasa de crecimiento. En cierto tiempo, la población alcanza una capacidad de persistencia que la población no puede exceder. *Imagen: James Mihelcic y Julie Zimmerman (Ingeniería Ambiental)*

Ahora bien, considere que una población tiene una biomasa inicial $2 mg DW/L$, una tasa de crecimiento específica de $1.1/día$, un coeficiente de respiración de $0.1/día$ y una capacidad de persistencia de $5000 mg DW/L$

- Utilizar el método de Euler para encontrar la cantidad de biomasa diaria en un lapso de 15 días.
- Comparar los resultados con la solución exacta que se presenta a continuación:

$$s(t) = \frac{K}{1 + [((K - s_0)/s_0)e^{-(\mu_{\max} - k_d)t}]}$$

Calcular el error verdadero, ¿Porque hay discrepancia en los resultados? y ¿cómo puede mejorarse?

- Indicar cuál es la población de biomasa en un periodo de 10 días.
- Graficar en mismo plano $f = s(t)$ y la tasa de crecimiento específico $\mu(t)$.
- Explicar (acorde a los resultados) que sucede con la cantidad de biomasa para un tiempo muy largo.

4.- Los problemas de dilución juegan un papel importante en el estudio de la modelización de la calidad del agua y el aire puesto que permiten estudiar la tasa de acumulación de contaminantes. Un modelo ampliamente utilizado viene dado por el siguiente PVI:

$$A'(t) = v_1 c_1 - v_2 \frac{A}{V + (v_1 - v_2)t} \quad ; \quad A(t_0) = A_0$$

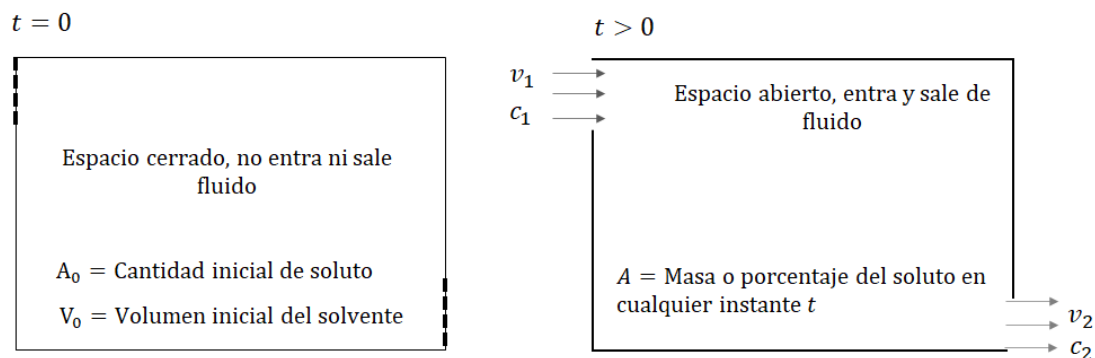


FIGURA 5.15. Escenario de disolución.

siendo A' = tasa de acumulación (g/min) de un soluto en cierto espacio, A = cantidad acumulada de soluto (g), A_0 = cantidad inicial de soluto (g), v_1 = velocidad de entrada del fluido en (m^3/min), c_1 = concentración de la mezcla de entrada (g/m^3), v_2 = velocidad de salida del fluido en (m^3/min), V = volumen inicial del fluido (m^3) y t = tiempo (s) (véase Fig. 5.15). En este contexto supóngase que el aire de una habitación con 180m^3 de volumen

contiene inicialmente 0.15% de CO₂. Luego aire nuevo con 0.05% de CO₂ circula hacia adentro de la habitación a través de una ventana en una cantidad de 2 m³/min.

- Utilizar el método RK4 con un paso de $h = 0.5$ para determinar el porcentaje de CO₂ como función del tiempo en los casos en que circula aire hacia afuera por una segunda ventana con una proporción comparada con el aire que entra, sea: nula, igual, la mitad o el doble.
- Comparar los resultados con las soluciones exactas según el caso

$$\text{Si } v_2 = 0 \quad A(t) = c_1 v_1 t + A_0$$

$$\text{Si } v_1 = v_2 = v \quad A(t) = c_1 V + (A_0 - c_1 V)e^{-vt/V_0}$$

$$\text{Si } v_1 \neq v_2 \quad A(t) = c_1 [V + (v_1 - v_2)t] + (A_0 - c_1 V)[1 - (v_1 - v_2/V)t]^{v_2/(v_2 - v_1)}$$

Calcular el error verdadero, ¿Porque discrepancia en los resultados? y ¿cómo puede mejorarse?

- Analizar (acorde a cada caso) que sucede en periodos prolongados.

5.- Existe evidencia considerable para apoyar la teoría de que para algunas especies hay una población mínima m , tal que estas se extinguirán si el tamaño de la población cae por debajo de m (umbral de Allee). Esta condición se puede incorporar en la ecuación logística introduciendo el factor $(1 - m/p)$. Así, el modelo logístico modificado está dado por la ecuación diferencial que se presenta a continuación:

$$p'(t) = kp(1 - p/L)(1 - m/p) ; \quad p(t_0) = p_0$$

siendo p' =Tasa de incremento de población, p = población en cualquier instante dado, t = el tiempo comúnmente en años, L =la capacidad límite o de soporte del ecosistema, k = constante de crecimiento y p_0 =la población inicial. Dados los valores $k = 0.08$, $L = 1000$ y $m = 200$

- Resolver la ecuación diferencial con el método RK4. Tomar una población inicial de forma arbitraria y $h = 1$.
- Comparar los resultados con la siguiente solución exacta:

$$p(t) = \frac{m(L - p_0) + k(p_0 - m)e^{(L-m)(k/L)t}}{L - p_0 + (p_0 - m)e^{(L-m)(k/L)t}}$$

Calcular el error verdadero,
¿Porque hay discrepancia en los
resultados? y ¿cómo puede
mejorarse?

- c) Describir qué le sucede a la población para varios valores iniciales. ¿Cuáles son las soluciones de equilibrio?
- d) Indicar que sucede si $m < p < L$ y si $0 < p < m$.
- e) Mostrar que si $p_0 < m$ la especie se extingue.
- f) Investigar la importancia del PVI presentado (**Efecto Allee**) en la ingeniería ambiental.



Warder Clyde Allee (1885-1955) segundo desde la izquierda. Ecólogo estadounidense adscrito a la universidad de Chicago. Allee demostró que los individuos de una población pueden estar peor cuando la población llega a ser muy pequeña o muy escasa. Existen numerosas razones ecológicas de porque podría suceder esto; por ejemplo, pueden no encontrar un compañero adecuado o pueden necesitar grandes grupos para encontrar comida o expresar su comportamiento social, o, en el caso de los peces de colores, los grupos pueden alterar la química del agua a su favor. Fotografía: Universidad de Chicago (Archivos fotográficos).

6.- Suponga que las poblaciones de conejos y lobos se describen mediante las ecuaciones de Lotka - Volterra (Sec. 5.6) con $a = 0.08, b = 0.001, c = 0.02$ y $d = 0.00002$. El tiempo t se mide en meses. A partir de estos datos resuelva los siguientes incisos:

- a) Encontrar las soluciones constantes (llamadas soluciones de equilibrio) e interprete la respuesta.
- b) Usar las ecuaciones de Lotka-Volterra con el fin de hallar una expresión para $y'(x)$.
- c) Utilizar como valores iniciales los resultados del inciso a y resolver la ecuación diferencial del resultado del inciso b.
- d) Hacer la gráfica $y = f(x)$ Número de zorros (depredador) en función de las presas (conejos).
- e) Suponer que en algún punto del tiempo hay 1 000 conejos y 40 lobos. Dibuje la curva solución correspondiente y emplearla para describir los cambios en ambos niveles de población.

- f) Usar el valor anterior como valores iniciales en $t = 0$ y usando el método RK4 encontrar las poblaciones de conejos y lobos como funciones del tiempo.

7.- En la ingeniería ambiental los modelos de competencia se emplean para estudiar la dinámica poblacional de dos especies de animales que compiten por los mismos recursos (como alimento y espacio vital) dentro del mismo ambiente o ecosistema. Uno de los modelos que describe la interacción de dos especies en competencia es:

$$\begin{aligned}x'(t) &= x(a_1 - b_1x - c_1y), & x(t_0) &= x_0 \\y'(t) &= y(a_2 - b_2y - c_2x), & y(t_0) &= y_0\end{aligned}$$

donde las poblaciones $x(t)$ y $y(t)$ se miden en miles y t en años. Los parámetros a_1, a_2, b_1, b_2, c_1 y c_2 son constantes positivas. Supongase que cierta población de hienas x compite con cierta población de leones y por alimentos donde $a_1 = 2, a_2 = 1, b_1 = 0.4, b_2 = 0.1, y c_1 = c_2 = 0.3$

- Encontrar las poblaciones $x(t)$ y $y(t)$ empleado el método RK4 con $h = 0.25$ bajo las condiciones iniciales $x(0) = 1.5$ y $y(0) = 3.5$
- Describir cómo cambia cada población a medida que pasa el tiempo.
- Analizar las poblaciones en un periodo largo.
- Graficar la trayectoria de fase para la población de hienas y leones.
- Observar las dinámicas de las poblaciones al cambiar sus parámetros.



Leones y Hienas (Competencia Interespecífica). Los seres vivos se relacionan interactuando unos con otros. Estas interacciones pueden interpretarse como comportamientos de un individuo dirigidos a otro, cuyos costes y beneficios pueden ser positivos o negativos. Según si se producen entre individuos de la misma especie o entre individuos de diferentes especies se habla de relaciones intraespecíficas o interespecíficas respectivamente. La competencia es un tipo de interacción que marca las dinámicas poblacionales y que constituye un factor clave para la supervivencia. Fotografía: Andrea Márquez (Ecología Verde).

8.- La Fig. 5.16 muestra un escenario de problemas de disolución donde un soluto disuelto en un fluido entra a un espacio 1 a una velocidad v_1 y concentración c_1 . La solución bien

homogeneizada de concentración c_2 sale del espacio 1 y entra al espacio 2 a una velocidad v_2 . A su vez, la solución bien homogeneizada del espacio 2 de concentración c_3 sale a una velocidad v_3 . La tasa de acumulación del soluto en los espacios 1 y 2 vienen dado por el siguiente PVI:

$$A_1'(t) = v_1 c_1 - v_2 \frac{A_1}{V_1 + (v_1 - v_2)t} \quad , \quad A_1(t_0) = A_{01}$$

$$A_2'(t) = \frac{A_1 v_2}{V_1 + (v_1 - v_2)t} - \frac{A_2 v_3}{V_2 + (v_2 - v_3)t} \quad , \quad A_2(t_0) = A_{02}$$

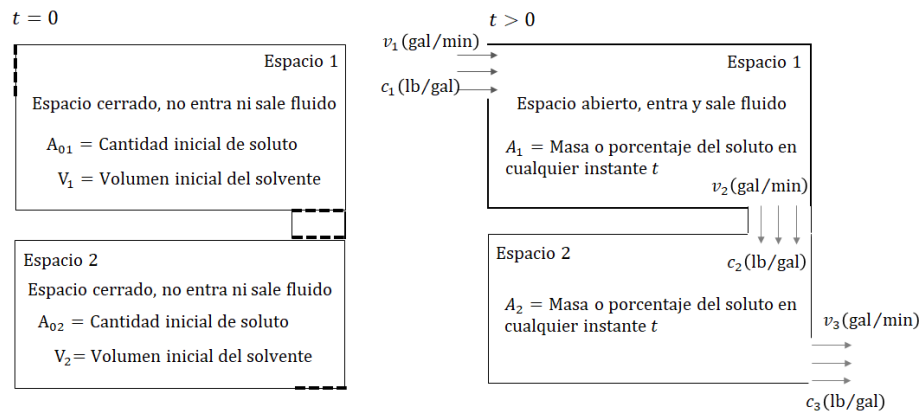


FIGURA 5.16. Escenario de disolución de dos tanques conectados.

siendo A_1 y A_2 la cantidad acumulada de soluto (g) en los espacios 1 y 2 respectivamente. En este sentido, supóngase que dos albercas contienen cada una 10 mil galones de agua con cloro al 0.01%. Las albercas están conectadas por un sistema de bombeo y una de ellas conecta con un sistema de bombeo de agua pública. A partir de $t = 0$ se bombea agua del servicio público con cloro al 0.001% hacia una alberca a razón de 5 gal/min. Simultáneamente se activa el sistema de bombeo que une a las albercas y el agua bien mezclada sale de una y entra en la otra con la misma razón. Por último, la segunda alberca drena agua con una rapidez de 5 gal/min.

- Utilizar el método RK4 con un paso de $h = 200$ para determinar el porcentaje de cloro como función del tiempo en las albercas.
- Analizar cómo cambian las soluciones si inicialmente la cantidad de agua y el porcentaje de cloro de cada una de ellas es diferente.

- c) Estudiar cómo cambian las soluciones si los drenados entre las albercas son diferente.
- d) Indicar que sucede con el incremento de cloro en periodos prolongados.
- e) Investigar acerca de los valores de concentración de cloro disuelto en agua aptos para el consumo humano.

9.- En problemas de modelización de la calidad superficial del agua, la ecuación de difusión es ampliamente utilizada para el estudio de transporte de contaminantes. Un modelo teórico unidimensional para la difusión química a través de una capa delgada queda descrita mediante la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = k \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - Lc$$

donde $c(x, t)$ es la concentración en moles/cm³, la difusividad k es una constante positiva con unidades de cm²/s y $L > 0$ es una tasa de consumo con unidades s⁻¹. Supóngase que en estado estacionario un compuesto c se difunde a través de un tubo de $d = 4$ cm de largo y reacciona conforme se difunde. En un extremo del tubo se encuentra una fuente grande de c_0 con concentración de 0.1 M (mol/L) y en el otro extremo un material que se absorbe con rapidez cualquiera c y hace que la concentración sea 0M. Si $k = 1.5 \times 10^{-6}$ cm²/s y $L = 5 \times 10^{-6}$ s⁻¹.

- a) Utilizar el método del disparo con $h = 0.5$ para determinar la concentración c como función de la distancia en el tubo.
- b) Resolver el inciso anterior empleando el método de diferencias finitas.
- c) Comparar los resultados con la solución exacta:

$$c(x) = c_0 \operatorname{csch}(\sqrt{L/k} d) \sinh[\sqrt{L/k} (d - x)]$$

- d) Estudiar cómo cambian las soluciones si se varían los parámetros k y L .
- e) Investigar las aplicaciones del PVF presentado (Ecuación de Difusión) en la ingeniería ambiental.

10.- La ecuación de advección-dispersión tiene diversas aplicaciones en la ingeniería ambiental, tales como el diseño de reactores y transporte de contaminantes a lo largo de caudales. Para un reactor alargado con un solo punto de entrada y salida (ver Fig. 5.17) donde la sustancia química a modelar está sujeta a un decaimiento de primer orden y el tanque está bien mezclado vertical y lateralmente. La ecuación de advección-dispersión, toma la siguiente estructura:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - U \frac{\partial c}{\partial x} - kc$$

donde c =concentración (moles/m³),
 t =tiempo en horas (h), D =coeficiente de dispersión (m²/h), x =distancia horizontal a lo largo del reactor (m), donde $x = 0$ es el punto en el que entra el contaminante, U =velocidad del agua que fluye a través del reactor en la dirección x (m/h) y k =es el coeficiente de decaimiento de primer orden (h⁻¹). Esta ecuación especifica que la turbulencia de mezclado tiende a mover la masa desde regiones de alta concentración hasta las de baja concentración. Ahora bien, supóngase que para un $t < 0$ el reactor se llena con agua libre de la sustancia química y posteriormente en $t = 0$ se inyecta tal sustancia química en el flujo de entrada del reactor a un nivel constante c_{en} . Así, se tienen las siguientes condiciones de frontera

$$c_{en} = c_0 - Dc'_0/U \quad \text{y} \quad c'(L, t) = 0$$



Sistemas de reactores para el tratamiento de aguas residuales. El análisis de reactores se refiere al uso de balances de masa para analizar las concentraciones de contaminantes en un control de volumen, ya sea en una reacción química, o bien, en un sistema natural que se simula mediante un reactor químico. Se pueden dividir los reactores ideales en dos tipos: reactores de mezcla completa (CMFR) o reactores tubulares (PFR). Los CMFR se usan como modelo de embalses medioambientales de mezcla perfecta y los PFR se comportan esencialmente como tuberías y se usan como modelo para situaciones como las del transporte río abajo, en donde el fluido no se mezcla a contracorriente en dirección río arriba. Fotografía: Caisa Metal Solutions.

La segunda condición específica que la sustancia sale del reactor simplemente como una función de flujo a través del tubo de salida. Es decir, se supone que la dispersión en el reactor no afecta la velocidad de salida. Bajo estas condiciones

- Utilizar el método de diferencias finitas para resolver el PVF en niveles de estado estacionario.
- Calcular a partir del resultado del inciso anterior la concentración a lo largo del reactor para los valores $D = 2$, $U = 1$, $h = 2.5$, $k = 0.2$ y $c_{en} = 100$.
- Indicar que ocurre con la solución si $D = 4$. ¿Qué ocurre con la turbulencia de mezclado?
- Concluir acerca del comportamiento de la concentración a lo largo del reactor.

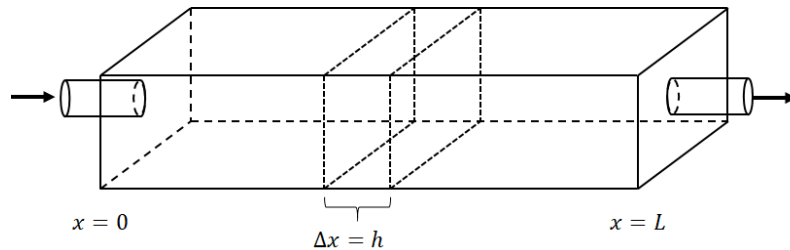


FIGURA 5.17. Reactor alargado con un solo punto de entrada y salida.

- Analizar qué ocurre si $h \leq 2D/U$. ¿Qué ocurre con el cálculo numérico?

5.7 Proyecto para grupo: Dinámica de fluido atmosférico

Los ingenieros ambientales modelan diversos problemas que implican sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales. Uno de ellos es el Modelo de Lorenz el cual se deduce de las ecuaciones de Navier-Stokes para el movimiento de un fluido y se utilizan para simular la atmósfera. Además de sus obvias aplicaciones en el pronóstico del tiempo, son útiles para estudiar la contaminación del aire y el cambio climático mundial.

El modelo de Lorenz viene dado por el siguiente PVI:

$$\begin{aligned}x'(t) &= -\sigma x + \sigma y & , & \quad x(t_0) = x_0 \\y'(t) &= rx - y - xz & , & \quad y(t_0) = y_0 \\z'(t) &= -bz + xy & , & \quad z(t_0) = z_0\end{aligned}$$

siendo x = la intensidad del movimiento del fluido atmosférico, y = variación de la temperatura en la dirección horizontal, z = variación de la temperatura en la dirección vertical, σ (Número de Prandtl) = cociente entre la viscosidad cinemática del fluido y la difusividad térmica r (Número de Rayleigh) = producto del número de Grashof (cociente entre las fuerzas de flotación y las fuerzas viscosas que actúan en un fluido) y el número de Prandtl y b = constante de proporcionalidad. Nótese que la no linealidad está dada por los productos xz y xy (Nieves y Domínguez, 2014). Dados los parámetros $\sigma = 10, b = 2.666667, r = 28$, las condiciones iniciales $x = y = z = 5$ en $t = 0$ y el intervalo de integración desde $t = 0$ hasta 20:

- Insertar el método numérico RK4 con doble precisión en una hoja de cálculo Excel para obtener las soluciones de estas ecuaciones. Es de resaltar que debe investigar la estructura del método RK4 para sistemas de ecuaciones diferenciales 3x3.
- Graficar los resultados para visualizar cómo las variables dependientes cambian con el tiempo. ¿Qué tipo de comportamiento exhiben?
- Diseñar la hoja de cálculo de forma tal que permita variar los parámetros y así visualizar el comportamiento gráfico de las soluciones.
- Graficar las variables dependientes unas contra otras para observar si surge algún patrón interesante.

- e) Analizar cómo cambia la solución si se varía ligeramente la condición inicial para x (de 5 a 5.001). ¿Qué puede concluirse?
- f) Indicar a partir de los resultados la conclusión de los estudios de Lorenz que sugieren que pronosticar el clima a largo plazo será imposible.
- g) Investigar porque a las soluciones del modelo de Lorenz se les conoce como soluciones caóticas.
- h) Concluir a partir de los resultados que se puede decir acerca del comportamiento dinámico de la atmósfera y como está conectado con el cambio climático.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

Esquerro, J. (2012). Iniciación a los métodos numéricos. Universidad de la Rioja. Editorial: Iberus.

Chapra, S. & Canale, R. (2007). Métodos numéricos para ingenieros, 5ta ed. México, D.F: McGraw-Hill.

Mihelcic, J. & Zimmerman, J. (2012). Ingeniería Ambiental: fundamentos, sustentabilidad, diseño, 1ra Ed. México, D.F: Alfaomega Grupo Editor.

Pazmiño, J. (2020). Fundamento de modelización de la calidad del agua. Universidad Técnica Estatal de Quevedo. Editorial: Grupo Compás.

Larson, R. & Edwards, B. (2010). Cálculo 1 de una variable, 9na ed. México, D.F: McGraw-Hill.

Larson, R. & Edwards, B. (2010). Cálculo 2 de varias variables, 9na ed. México, D.F: McGraw-Hill.

Stewart, J. (2008). Cálculo de una variable trascendentes tempranas, 6ta ed. México, D.F: Cengage Learning.

Quevedo, H. (2006). Métodos estadísticos para la ingeniería ambiental y la ciencia. Universidad Autónoma de Ciudad de Juárez.
<http://bivir.uacj.mx/LibrosElectronicosLibres/UACJ/ua00001.pdf>.

Mejía, A. (2006). Hidrología Aplicada. Lima: Universidad Nacional Agraria la Molina.

Miller, I. Freund, J. Johnson, R. (2011). Probabilidad y estadística para ingenieros, 8va ed. Naucalpan de Juárez: Pearson Educación.

Chapra, S. (2008). Surface water-quality modeling. Illinois: Waveland Press.

Zill, D. & Wrigth, W. (2015). Ecuaciones diferenciales con problemas en valores en la frontera, 8va ed. México, D.F: Cengage Learning.

Zill, D. (2018). Ecuaciones diferenciales con problemas en valores en la frontera, 9na ed. México, D.F: Cengage Learning.

Nagle, K. Saff, E. Snider, A. (2005). Ecuaciones diferenciales y problemas con valores en la frontera, 4ta ed. Naucalpan de Juárez: Pearson Educación.

Nieves, A. & Domínguez, F. (2014). Métodos numéricos aplicados a la ingeniería, 4ta ed. México, D.F: Grupo Editorial Patria.

APÉNDICES

Apéndice A

Sistemas de Ecuaciones lineales: Método de la matriz inversa.

Apéndice B

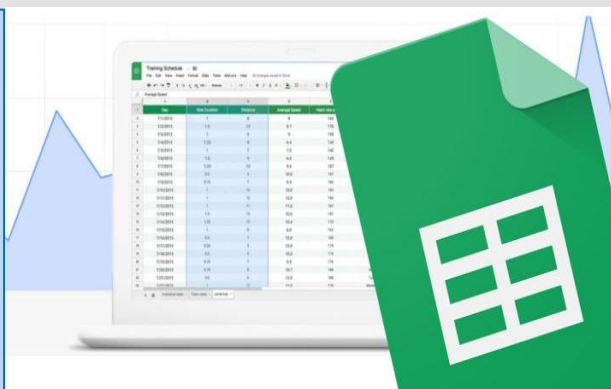
Minimización de la suma total de los cuadrados de las desviaciones.

Apéndice C

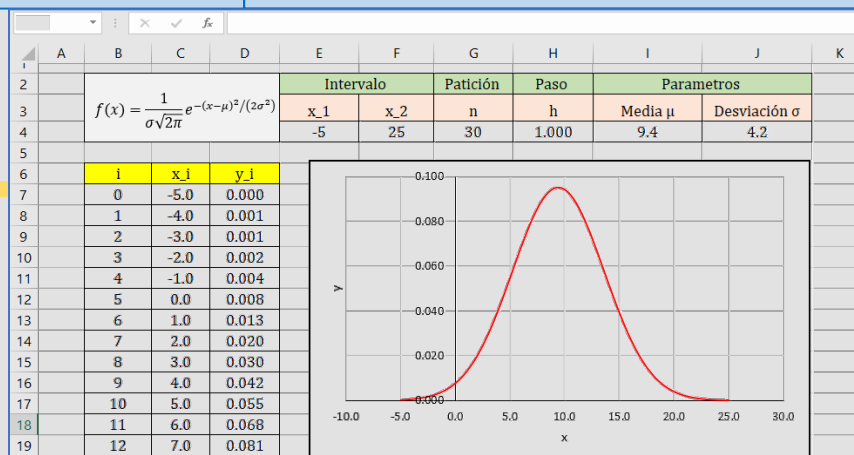
Regla Simpson 3/8.

Apéndice D

Repuesta de los problemas con literales seleccionados



Microsoft Excel. La hoja de cálculo Excel es una herramienta computacional muy útil para efectuar cálculo numérico. Sus opciones de fórmulas y diseño de hojas permiten efectuar cálculos extensos de una manera rápida y efectiva. El apéndice A muestra un ejemplo práctico en la solución de un sistema de ecuaciones lineales (nxn) con un gran número de incógnitas desarrolladas por el método de la matriz inversa gracias a sus funciones: MINVERSO (devuelve la matriz inversa de una matriz almacenada en una matriz) y MMULT (devuelve el producto matricial o la multiplicación de dos matrices). Imagen: Rafael García Rodríguez (As-MeriStation).



Curva de distribución de probabilidad Gaussiana en Excel.

Apéndice A Sistemas de Ecuaciones lineales: Método de la matriz inversa

Dado un sistema de ecuaciones lineales como el que se presenta a continuación:

$$\begin{array}{ccccccc}
 a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + \cdots + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\
 a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + \cdots + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\
 a_{31}x_1 & + & a_{32}x_2 & + \cdots + & a_{3n}x_n & = & b_3 \\
 & & \vdots & & \vdots & & \\
 & & \vdots & & \vdots & & \\
 & & \vdots & & \vdots & & \\
 a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + \cdots + & a_{nn}x_n & = & b_n
 \end{array} \tag{A.1}$$

donde las a son los coeficientes constantes, las b son los términos independientes constantes y n el número de ecuaciones. La solución única del sistema consiste en determinar los valores $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ que satisfacen las n ecuaciones. Sin embargo, debe notarse que en este tipo de sistemas no siempre se obtienen soluciones o simplemente se tienen una infinidad de éstas. Un procedimiento para determinar una solución es el método de la matriz inversa.

Ahora bien, de los cursos de álgebra se conoce que los sistemas de ecuaciones lineales tienen una representación matricial de la forma:

$$[A]\{X\} = \{B\} \quad \text{con} \quad [A] = \begin{bmatrix} a_{11} & + & a_{12} & + \cdots + & a_{1n} \\ a_{21} & + & a_{22} & + \cdots + & a_{2n} \\ a_{31} & + & a_{32} & + \cdots + & a_{3n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & + & a_{n2} & + \cdots + & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad \begin{array}{l} \{B\}^T = [b_1, b_2, b_3, \dots, b_n] \\ y \\ \{X\}^T = [x_1, x_2, x_3, \dots, x_n] \end{array} \tag{A.2}$$

siendo $[A]$ la matriz n por n de coeficientes a , $\{B\}$ el vector columna n por 1 de las constantes b y $\{X\}$ el vector columna n por 1 de las incógnitas x . Ahora bien, una solución para $\{X\}$ de la Ec. A.2 se obtiene usando álgebra matricial multiplicando cada lado de la ecuación por la inversa de $[A]$ (en el caso de que $[A]$ sea no singular), esto es:

$$[A]^{-1}[A]\{X\} = \{B\}[A]^{-1} \tag{A.3}$$

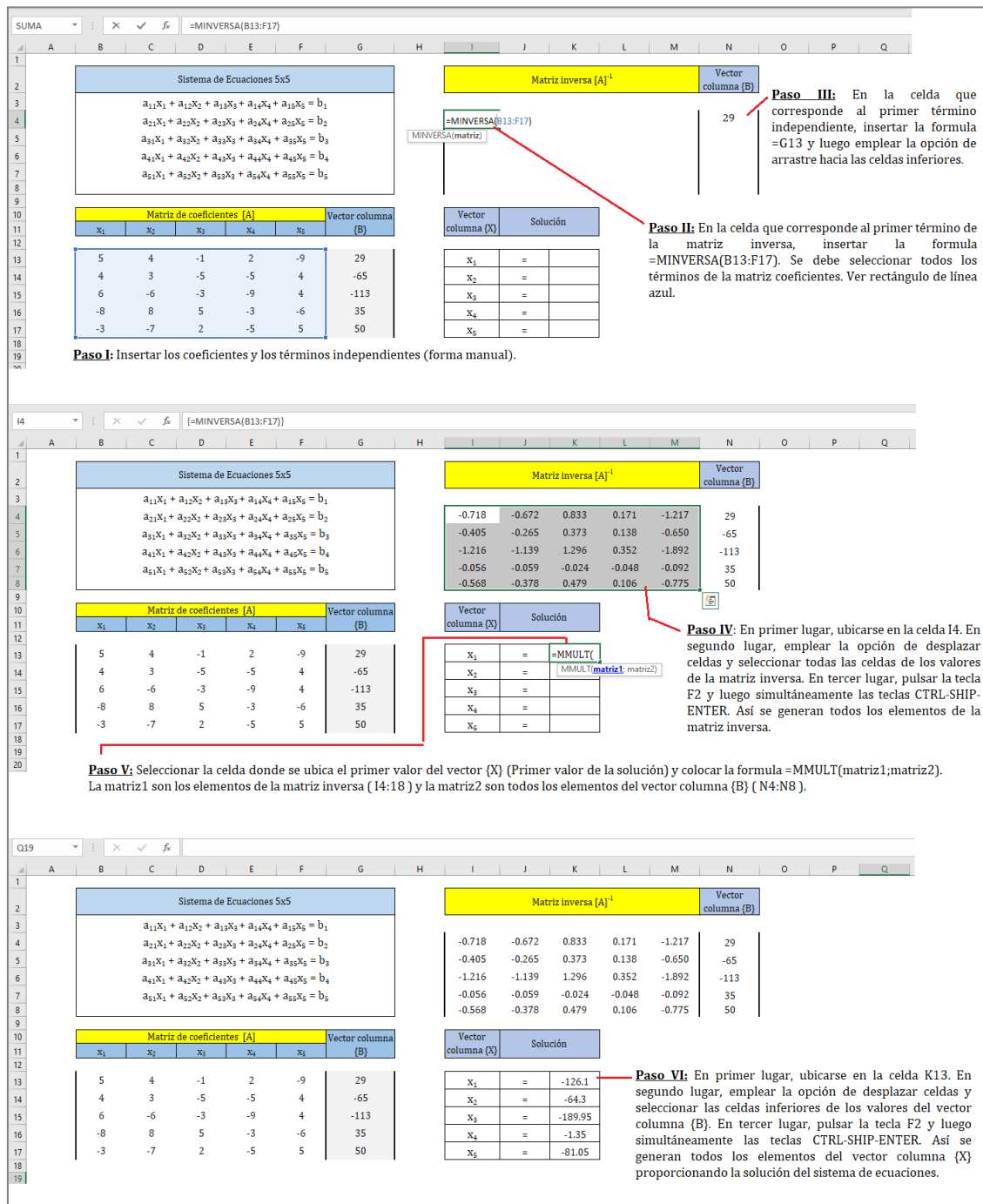


FIGURA A.1. Solución de un sistema de ecuaciones 5x5 por el método de la matriz inversa en una hoja de cálculo Excel.

como el producto $[A]^{-1}[A]$ es igual a la matriz identidad, la ecuación se convierte en:

$$\{X\} = \{B\}[A]^{-1} \quad (A.4)$$

En efecto, se ha encontrado la solución $\{X\}$ de la Ec. A.2. La Fig. A.1 muestra el método de la matriz inversa en una hoja de cálculo Excel. Nótese que la configuración solo requiere el valor de los coeficientes y si el sistema tiene solución única automáticamente se tendrá la solución para cualquier sistema 5x5. Además, si se siguen los pasos detallados en la Fig. A.1, se pueden resolver sistemas con mayor número de ecuaciones y de incógnitas. Cabe destacar que estas soluciones se pueden construir por Excel gracias a que el Software tiene entre sus opciones el cálculo de la inversa de una matriz mediante la fórmula =MINVERSA (matriz) y el cálculo de la multiplicación de matrices mediante la fórmula =MMULT(matriz1;matriz2).

Apéndice B Minimización de la suma total de los cuadrados de las desviaciones.

Sea

$$S_r = \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i)]^2 \quad (\text{B. 1})$$

la suma total de los cuadrados de las desviaciones de una curva que mejor se ajusta a un conjunto de datos. En el caso de un ajuste lineal $f(x) = ax + b$

$$S_r = \sum_{i=1}^n [y_i - b - ax_i]^2. \quad (\text{B. 2})$$

Nótese, que un aspecto importante de la función S_r es que los símbolos x_i y y_i son constantes mientras que a y b son las variables (incógnitas). Así pues, el problema de encontrar la línea recta que se ajusta mejor a un conjunto de datos se resume a determinar los valores a y b que minimizan a S_r . En efecto, en el lenguaje del cálculo la derivada parcial de S_r respecto a la variable a y la derivada parcial de S_r respecto a la variable b deben anularse, esto es:

$$\begin{aligned}\frac{\partial S_r}{\partial a} &= \sum_{i=1}^n 2[y_i - b - ax_i][-x_i] = 0 \\ \frac{\partial S_r}{\partial b} &= \sum_{i=1}^n 2[y_i - b - ax_i][-1] = 0\end{aligned}\tag{B.3}$$

Dado que la sumatoria opera sobre los elementos con el índice i y aplicando un poco de álgebra se desprende el siguiente sistema de ecuaciones (2x2):

$$\begin{aligned}bn + a \sum_{i=1}^n x_i &= \sum_{i=1}^n y_i \\ b \sum_{i=1}^n x_i + a \sum_{i=1}^n x_i^2 &= \sum_{i=1}^n x_i y_i\end{aligned}\tag{B.4}$$

Donde una forma de obtener su solución (método de reducción) consiste en multiplicar la primera ecuación por la $\sum_{i=1}^n x_i$ para luego multiplicar la segunda ecuación por $-n$ y posteriormente sumar ambas ecuaciones. Así el sistema se resume a una sola ecuación cuya única variable es a , que al resolver resulta:

$$a = \left[n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i \right] / \left[n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \right]\tag{B.5}$$

y que luego al revolver para b

$$b = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n y_i + a \sum_{i=1}^n x_i \right)\tag{B.6}$$

En consecuencia, los valores de a y b se construyen a partir de los mismos datos. En términos generales dependiendo de la curva de ajuste a construir se generan sistemas de ecuaciones lineales e inclusive no lineales. En el caso de ajustes

polinómicos el número de ecuaciones e incógnitas es equivalente a la cantidad de parámetros a determinar.

Apéndice C Regla Simpson 3/8

Sea f una función continua en el intervalo $[a, b]$ y sea n un número $n \geq 3$. La regla Simpson 3/8 para aproximar el área bajo la curva representada por la integral definida está dada por:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{3(b-a)}{8n} \left[f(x_0) + 3 \sum_{i=1,4,7}^{n-2} f(x_i) + 3 \sum_{i=2,5,8}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{i=3,6,9}^{n-3} f(x_i) + f(x_n) \right] \quad (C.1)$$

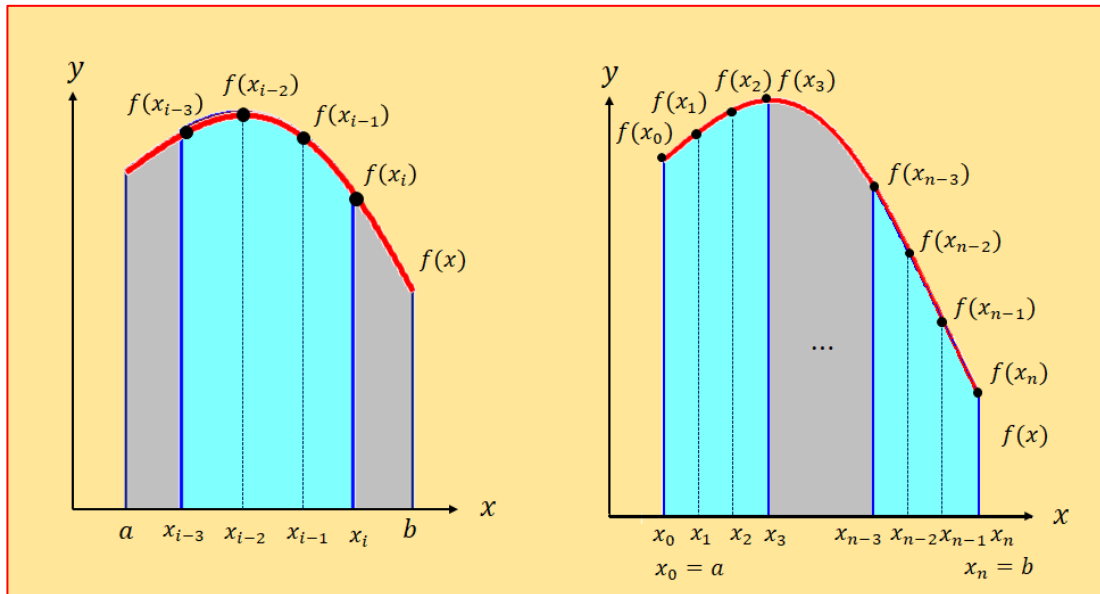


FIGURA C.1. Geometría de la regla Simpson 3/8.

donde la localización de los valores de $x_i = x_0 + (b-a)i/n$ para $i = 0, 1, 2, 3, \dots, n$ y $x_0 = a$. Esta regla es un caso particular de la fórmula de Newton-Cotes en el caso donde la aproximación se efectúa con el polinomio $p_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n$ de grado tres. La descripción gráfica de la regla de Simpson 3/8 consiste en aproximar las áreas bajo la curva con áreas formadas por segmentos curvos definidos por polinomios cúbicos y el eje x unido

por cuatro puntos tal y como se muestra en los gráficos de la Fig. C.1. Nótese que el método se puede emplear sólo si el número de segmentos es múltiplo de 3 dado que los subintervalos se agrupan en particiones tales que

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < x_3 < x_4 < x_5 < x_6 \cdots < x_{n-3} < x_{n-2} < x_{n-1} < x_n = b \quad (C.2)$$

$\underbrace{[x_0, x_3]} \quad \underbrace{[x_3, x_6]} \quad \underbrace{[x_{n-3}, x_n]}$

Ahora bien, la regla Simpson tiene un error de

$$E_t = -\frac{(b-a)^5}{6480} \bar{f}^{(4)}(\xi), \quad a \leq \xi \leq b. \quad (C.3)$$

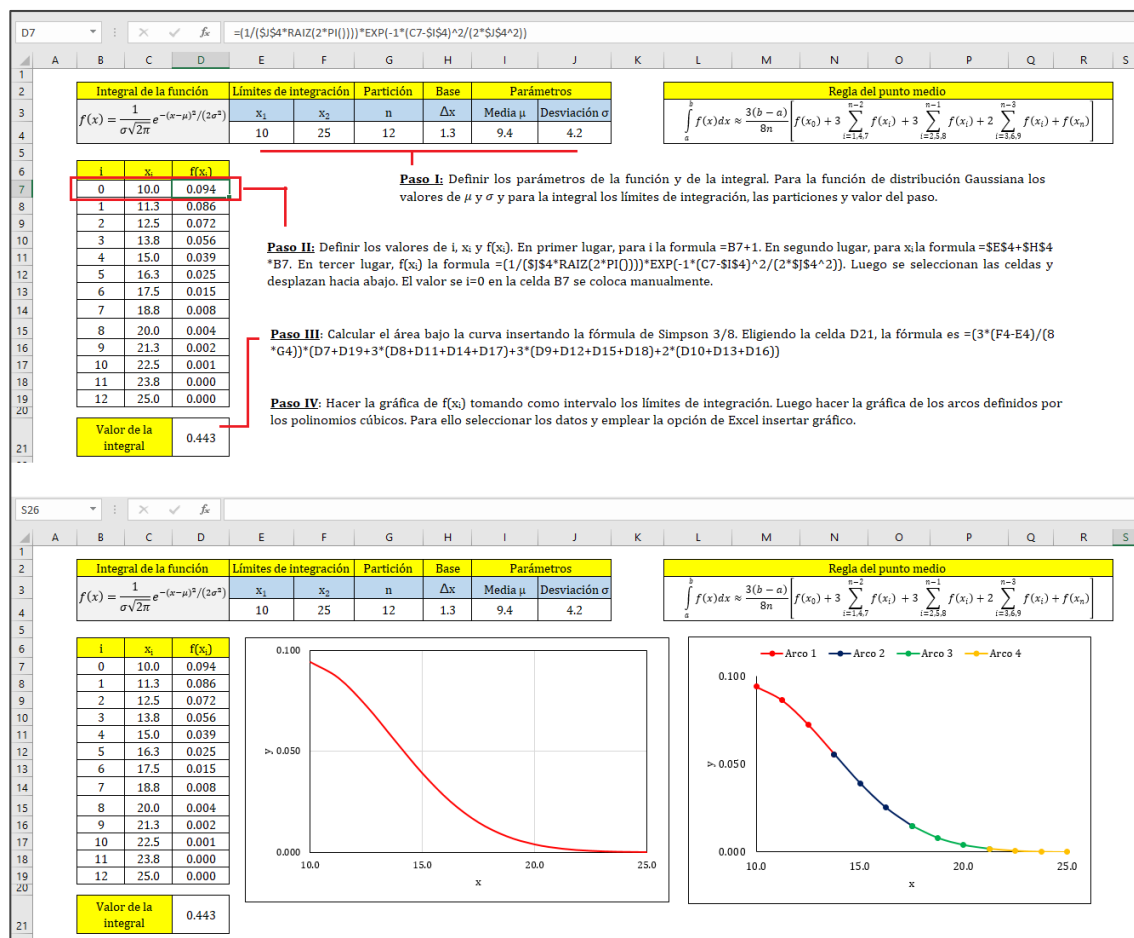


FIGURA C.2. Cálculo de área empleando la regla de Simpson 3/8 con $n = 12$.

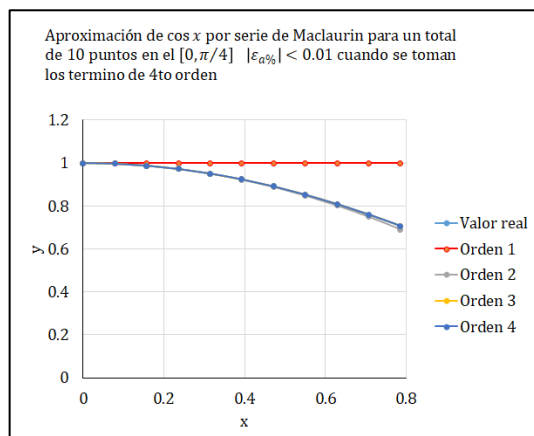
Por inspección debido a la presencia en el denominador del número 6480 se tiene que la regla Simpson 3/8 es más exacta que la regla 1/3. Sin embargo, en diversos casos se prefiere la Regla Simpson 1/3 ya que alcanza una exactitud de tercer orden en lugar de los cuatro puntos requeridos por la regla 3/8.

La Fig. C.2 muestra el cálculo del área bajo la curva por medio de la regla Simpson 3/8 de la función de distribución Normal con desviación estándar $\sigma = 4.2$ y media $\mu = 9.4$ en el intervalo $[10.25]$ para una partición $n = 12$ en una hoja de cálculo Excel. Los procedimientos para la inserción de los valores de la función, la integral y de la regla Simpson 3/8 se detallan paso por paso. Nótese que en la hoja se pueden ajustar los parámetros μ, σ y el intervalo de integración, permitiendo así visualizar el comportamiento gráfico de la función como el cambio del valor en el área. También es de resaltar que por aspectos didácticos se ha insertado la fórmula de la distribución normal $(=EXP(-1*(C7-\$I\$4)^2/(2*\$J\$4^2)))/(\$J\$4*RAIZ(2*PI()))$, no obstante entre sus funciones Excel tiene disponible la fórmula $=DISTR.NORM.N(x;media;desviación\ estandar;acumulado)$ que permite de una manera más sencilla construir la tabla de valores con su respectiva gráfica.

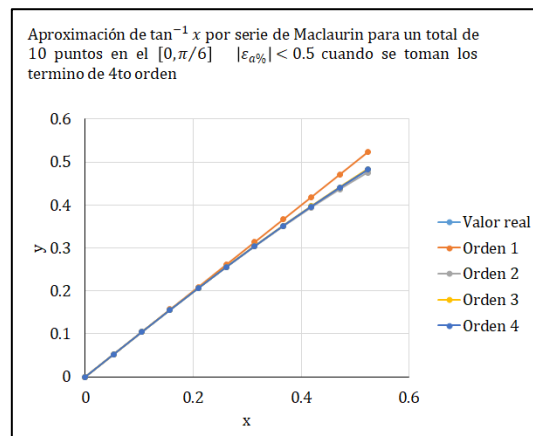
Apéndice D Repuesta a los problemas con literales seleccionados

Respuestas a los problemas de la sección 1.7

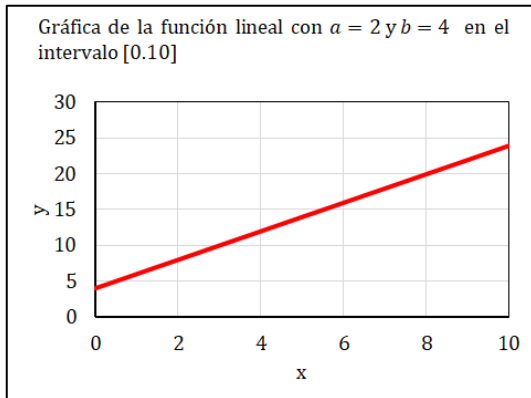
1.



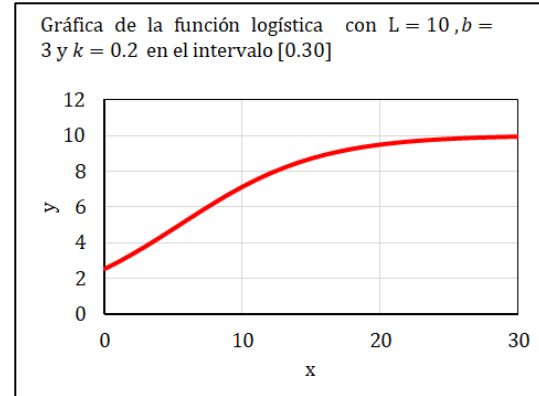
2.



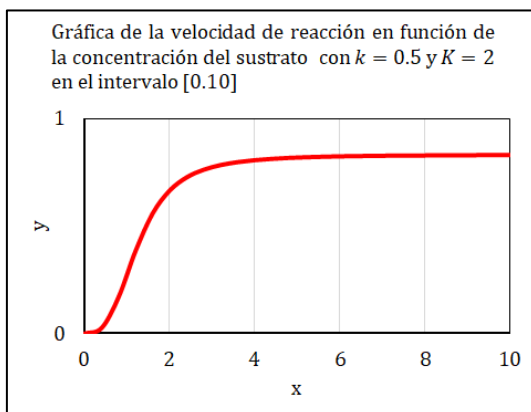
3.
Literal a)



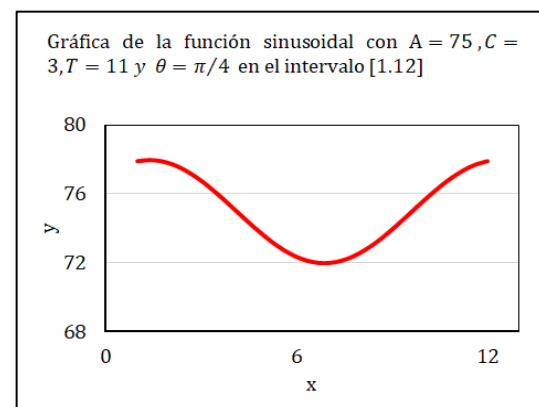
4.
Literal a)



5.
Literal a)

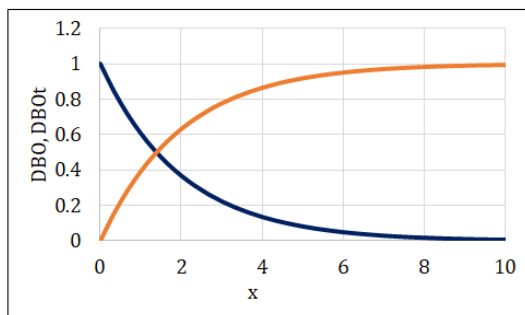


6.
Literal a)



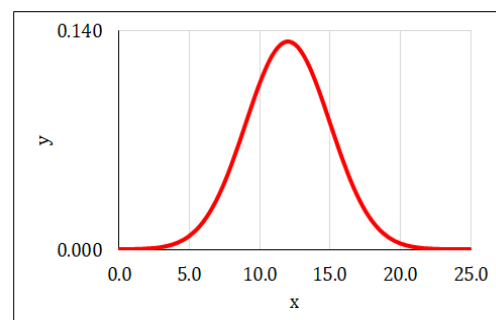
7.
Literal a)

DBO_t y DBO_{∞} con $L_0 = 1$ y $k = 0.5$



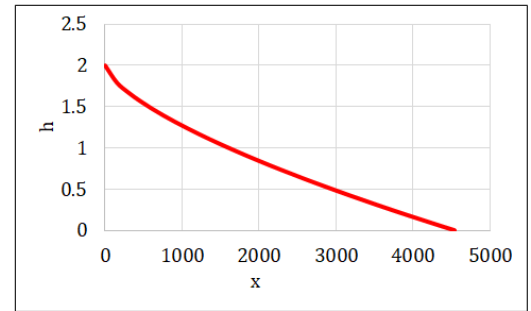
8.
Literal a)

Distribución normal con $\mu = 12$ y $\sigma = 3$ en el intervalo $[0,25]$



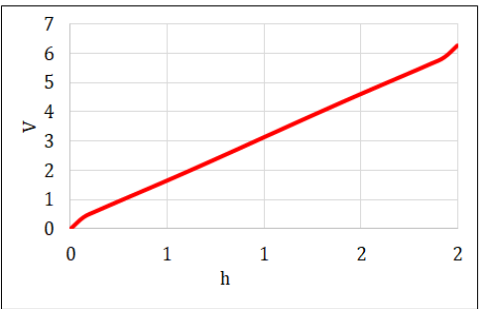
9.
Literal a)

Nivel de agua del tanque como función del tiempo dados los parámetros $g = 9.8, k = 0.6, \varphi = 0.05, L = 2$ y $R = 1$.
Tiempo de vaciado $t_v = 4543s$



10.
Literal a)

Volumen de agua en función de nivel h para $L = 2$ y $R = 1$

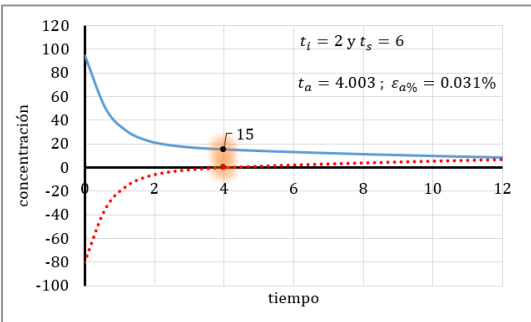


Literal c)

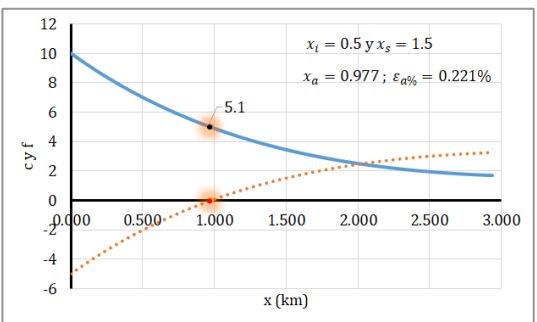
h	2R	3R/2	R	R/2	0
V %	100.00%	38.10%	50.00%	26.44%	0.00%

Respuestas a los problemas de la sección 2.8

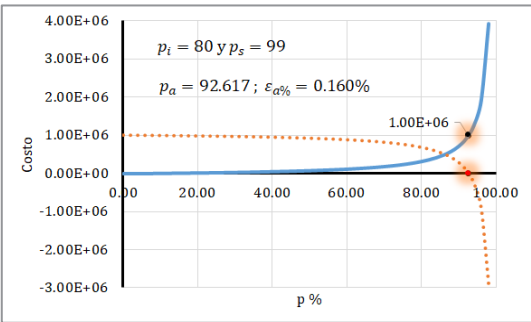
1.Literal a) y b)



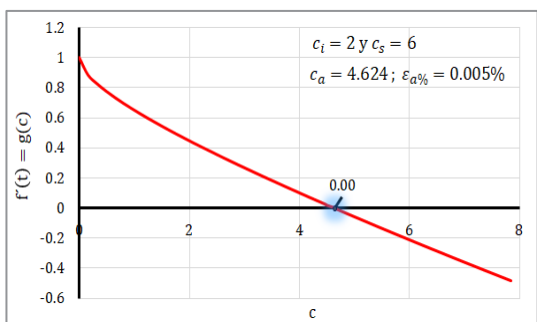
2. Literal a)



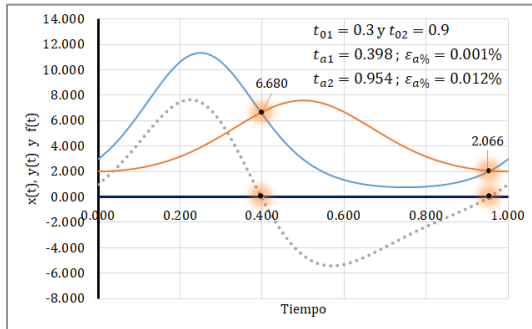
3.
Literal a)



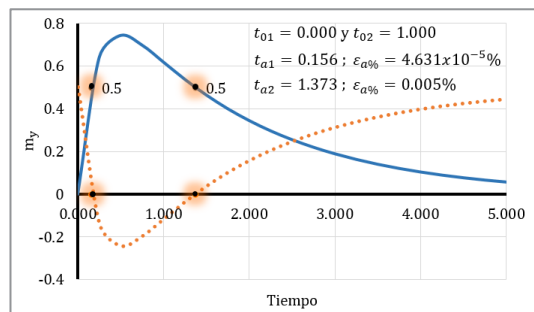
4.
Literal a)



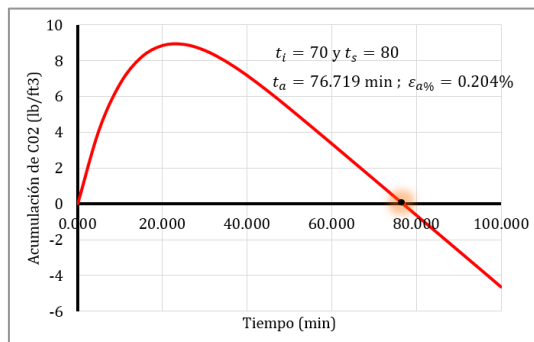
5.
Literal a)



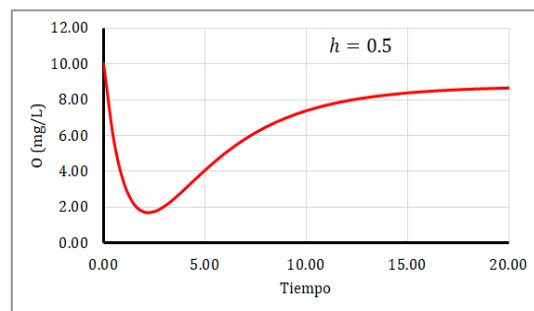
6.
Literal a)



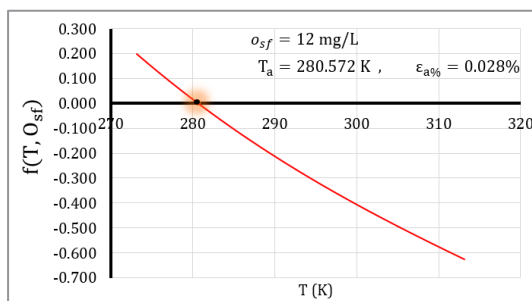
7.



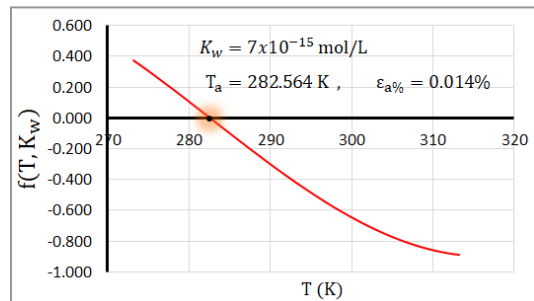
8.
Literal a)



9.
Literal a) y b)



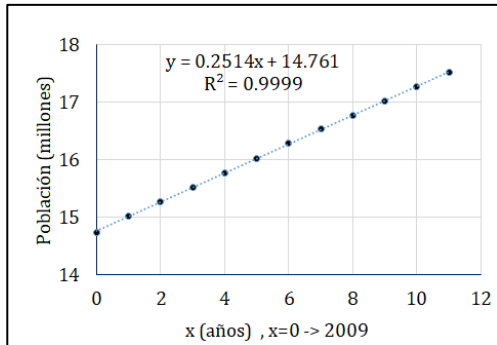
10.
Literal a)



Respuestas a los problemas de la sección 3.8

1.

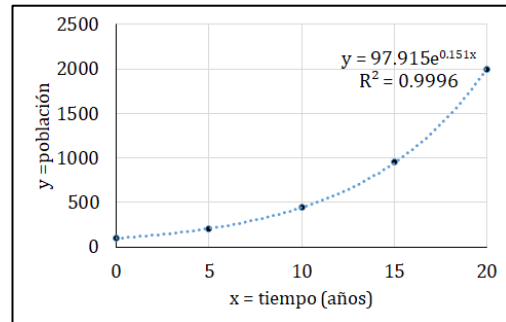
Literal a) y b)



Literal c) 20.040 millones de habitantes
y d) 251400 personas por año

2.

Literal a) y b)

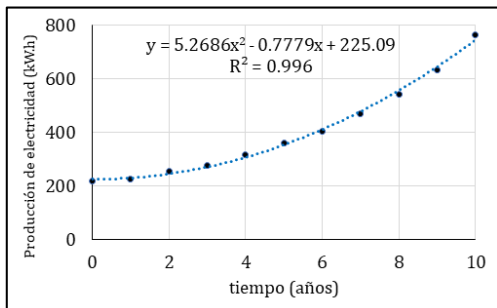


Modelo lineal $y = 91x - 170$ con $R^2 = 0.856$.

Literal d) 600 personas

3.

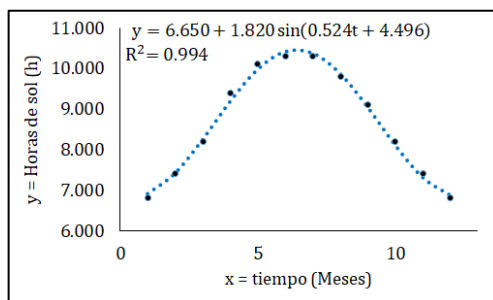
Literal a) y b)



Literal c) 1398.86 miles de millones
kW · h.

4.

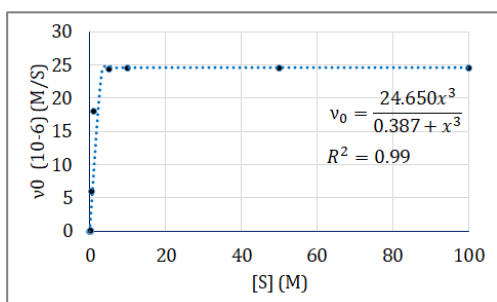
Literal a) y b)



Literal c) 6.650 h ; T = 12 meses

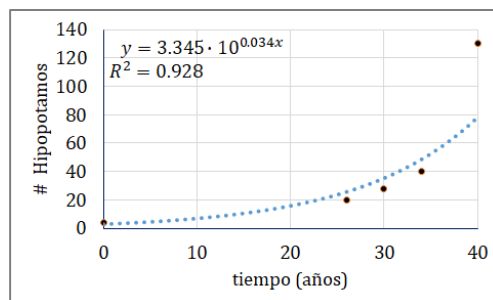
5.

Literal a) y b)



6.

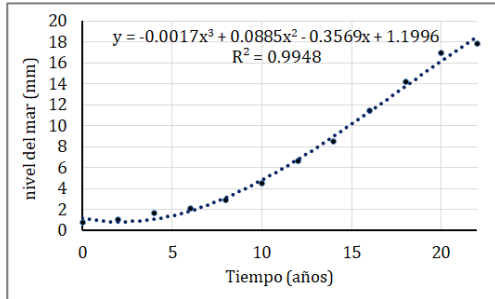
Literal a) y b)



Literal c) 235 hipopotamos

7.

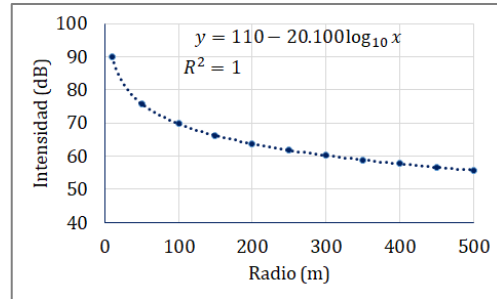
Literal a) y b)



Literal c) 24.24 milímetros

8.

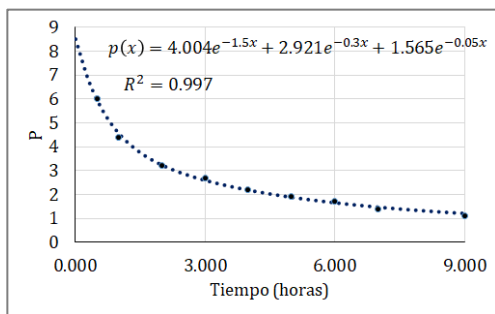
Literal a) y b)



Literal c) 31.08 metros

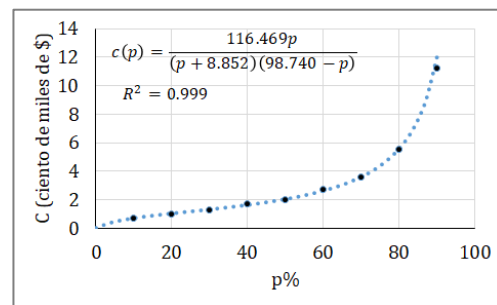
9.

Literal a)



10.

Literal a) y b)



$a = -116.469$, $b = 8.852$ y $c = -98.740$

Respuestas a los problemas de la sección 4.5

1.

Literal a) Aproximadamente 293 industrias, b) Aproximadamente 292 industrias y c) Aproximadamente 21 industrias.

2.

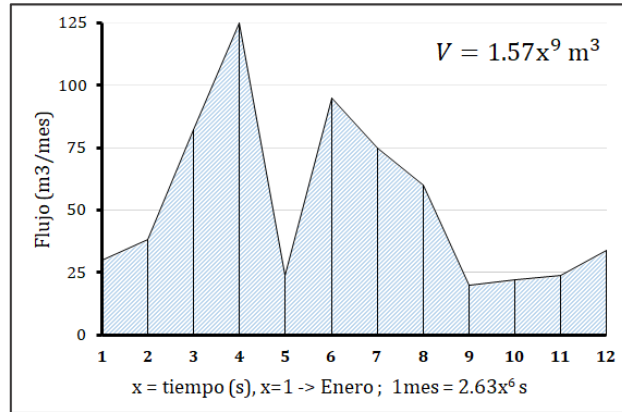
Literal a) Aproximadamente un tiempo de retorno de 3.637 años con $\varepsilon_{t\%} = 0.013\%$

3.

Una probabilidad de 49.02%

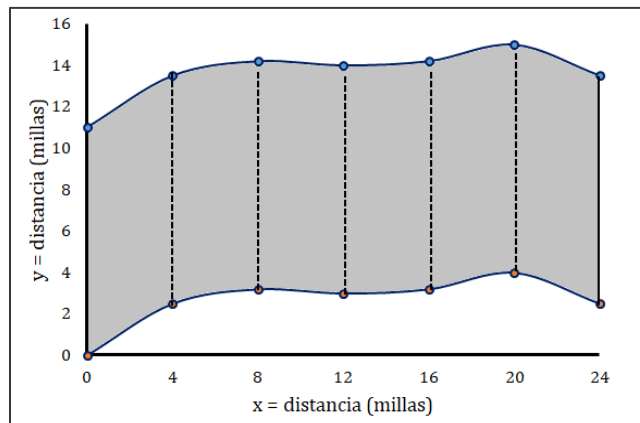
4.

Literal a) Un volumen de $1.57 \times 10^9 \text{ m}^3$



5.

Literal a), b) Un volumen de $2.73 \times 10^{-5} \text{ m}_i^3$ por ambos métodos y Literal c) Aproximadamente 716355 barriles



6.

La concentración promedio corresponde 7.11 g/m^3

7.

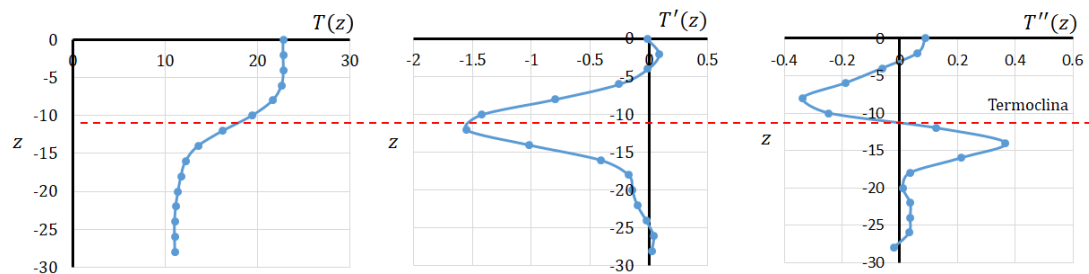
Literal a) Un volumen de 50436 L con $\varepsilon_{a\%} \approx 5\%$ y Literal b) Un volumen de 49464 L con $\varepsilon_{a\%} \approx 4\%$

8.

Literal a) $6.15 \times 10^7 \text{ W/m}^2$ y Literal b) $6.20 \times 10^7 \text{ W/m}^2$

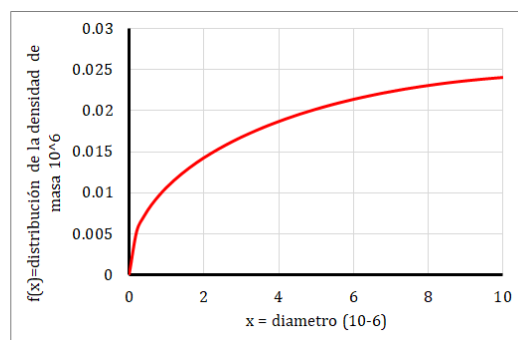
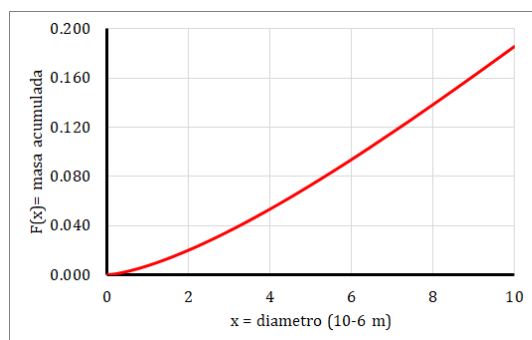
9.

Literal a) y b)



10.

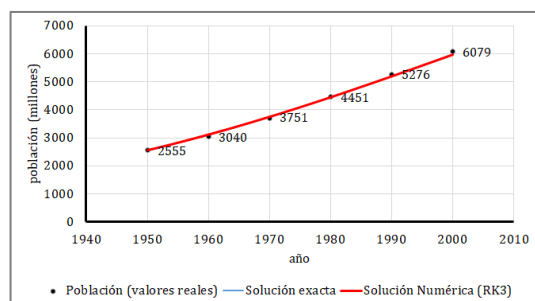
Literal a) y c)



Respuestas a los problemas de la sección 5.6

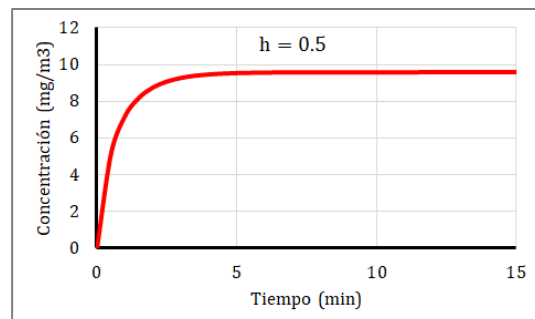
1.

Literal a), b), c) y d)

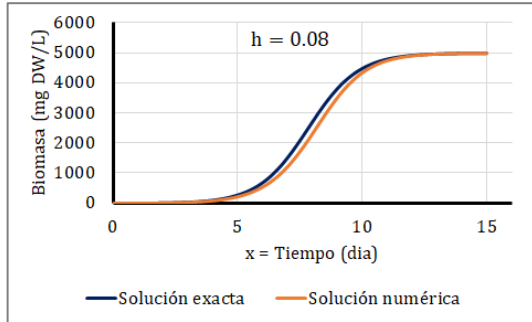


2.

Literal a)

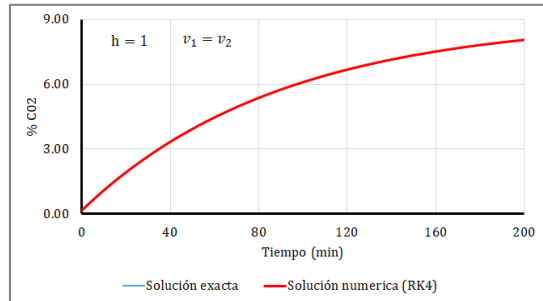


3.
Literal a) y b)

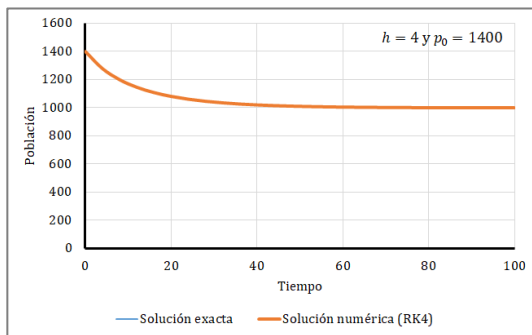


Literal c) 4491 mg DW/L con $\varepsilon_t\% \approx 3\%$

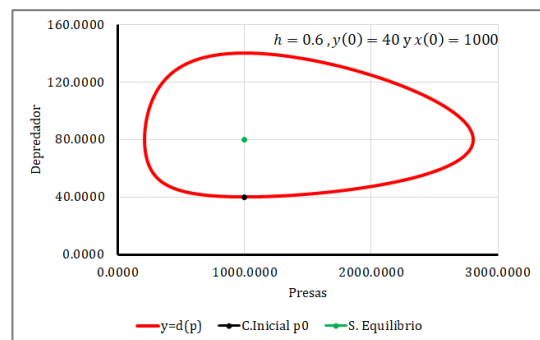
4.
Literal a) y b)



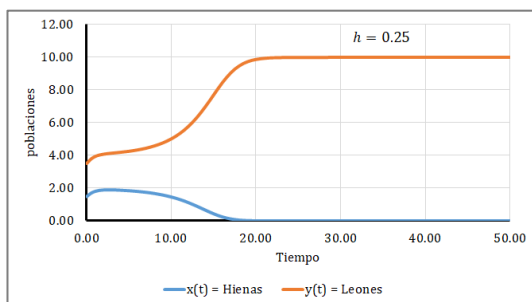
5.
Literal a) y b)



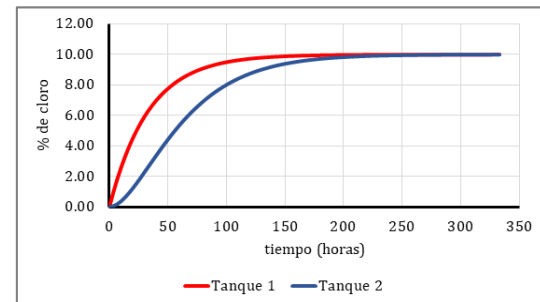
6.
Literal a), d) y e)



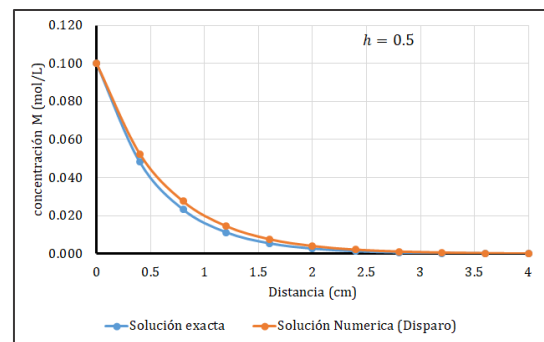
7.
Literal a), b) y c)



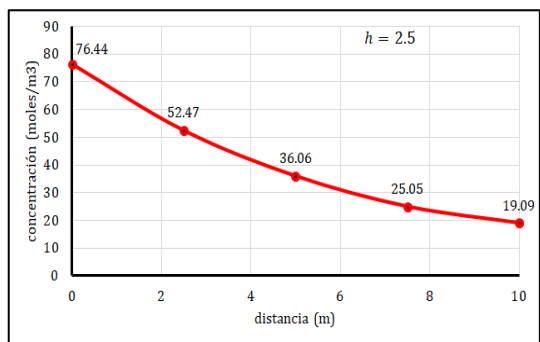
8.
Literal a) y d)



9.
Literal a) y c)



10.
Literal a) y b)



GLOSARIO DE TÉRMINOS

Términos	Definición
Algoritmo	En métodos numéricos un algoritmo es un grupo finito de operaciones organizadas y ordenadas que permite solucionar un cierto problema. Se trata de una serie de instrucciones o reglas establecidas que, por medio de una sucesión de etapas, permiten acercar el resultado real.
Balance de masa	Los balances de masa se basan en la ley de conservación de la masa (la masa de un sistema aislado es constante), y sirven para contabilizar los flujos y los cambios de masa en un sistema en particular, los cuales, proporcionan información muy valiosa para analizar los procesos de transformación que se encuentran en casi cualquier proceso natural
Basurología	Es el estudio de los desechos y de la basura producida por el ser humano. Como disciplina académica, fue pionera en la Universidad de Arizona y durante mucho tiempo fue dirigida por William Rathje. El proyecto comenzó en 1973, a partir de una idea de dos estudiantes para un proyecto de clase. Es una fuente importante de información sobre la naturaleza y los patrones cambiantes de la basura moderna y, por lo tanto, de la sociedad humana
Biomasa	Materia orgánica originada en un proceso biológico, espontáneo o provocado, utilizable como fuente de energía.

Capacidad de persistencia	Identifica la limitación de espacio y las pérdidas de densidad-dependencia una enfermedad y depredación como componentes de las condiciones medioambientales.
Cinética enzimática	Estudio de la velocidad de reacciones catalizadas enzimáticamente. La velocidad de una reacción catalizada por un enzima depende de la concentración de moléculas de sustrato, la temperatura, la presencia de inhibidores y el pH del medio
Curva logística	Curva logística o curva en forma de S es una función matemática que aparece en diversos modelos de crecimiento de poblaciones, propagación de enfermedades epidémicas y difusión en redes sociales. Dicha función constituye un refinamiento del modelo exponencial para el crecimiento de una magnitud.
Demanda bioquímica del Oxígeno	La DBO es una medida de la cantidad de oxígeno utilizado por los microorganismos en la estabilización de la materia orgánica biodegradable, en condiciones aeróbicas, en un periodo de cinco días a 20 °C.
Distribución Normal	La distribución normal (en ocasiones llamada distribución gaussiana) es la distribución continua que se utiliza más comúnmente en estadística, es un modelo que aproxima el valor de una variable aleatoria a una situación ideal, dependiendo de la media y la desviación típica.

Ecuaciones de Navier y Stokes	Las ecuaciones de Navier-Stokes son un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales que describen el movimiento de un fluido viscoso, nombradas así en honor al ingeniero y físico francés Claude-Louis Navier y al físico y matemático anglo irlandés George Gabriel Stokes. Estas ecuaciones gobiernan la atmósfera terrestre, las corrientes oceánicas y el flujo alrededor de vehículos o proyectiles y, en general, cualquier fenómeno en el que se involucren fluidos newtonianos.
Efecto Allee	El efecto Allee, así llamado por W.C. Allee, se produce cuando, a partir de cierto umbral, el tamaño poblacional es tan reducido que la tasa de supervivencia y/o la tasa reproductiva desciende debido a que los individuos no se reproducen al no encontrarse con más individuos de la misma población. Aunque el efecto Allee se produce de manera individual, afecta a toda la población debido a que no hay reclutamiento de nuevos individuos.
Horas de sol	Las horas de sol pico (HSP) en una unidad de medida de irradiación (energía) suponiendo una radiación constante de 1000 W/m^2 . Por lo tanto, es una magnitud que se mide en «horas». La hora de sol pico (HSP), es la energía recibida por una radiación de 1000 W/m^2 durante 1 hora. Este parámetro permite calcular de forma sencilla la energía recibida en un periodo de tiempo.

Iteración	Es un proceso que trata de resolver un problema matemático (como una ecuación o un sistema de ecuaciones) mediante aproximaciones sucesivas a la solución, empezando desde una estimación inicial.
Matriz	Una matriz es una tabla cuadrada o rectangular de datos (llamados elementos) ordenados en filas y columnas, donde una fila es cada una de las líneas horizontales de la matriz y una columna es cada una de las líneas verticales.
Microplástico	Son partículas de plástico menores a 5 mm hasta tamaños tan pequeños que son imperceptibles. Son producto de la degradación de los residuos plásticos.
Modelo de Lorenz	Es un modelo atmosférico propuesto por el meteorólogo estadounidense Edward Lorenz que consiste en una atmósfera bidimensional rectangular, cuyo extremo inferior está a una temperatura mayor que el superior. De esta manera el aire caliente subirá y el aire frío bajará creándose corrientes que harán un intercambio de calor por convección.
Modelo Streeter-Phelps	El modelo de Streeter-Phelps es un modelo matemático que relaciona los dos principales mecanismos que definen el oxígeno disuelto en un cauce de agua superficial que recibe la descarga de aguas residuales: Descomposición de materia orgánica, y aireación de oxígeno

Organismo patógeno	Es cualquier microorganismo capaz de producir alguna enfermedad o daño en un huésped, sea animal o vegetal
Producto iónico del agua	Es el producto de las concentraciones molares de los iones H^+ y OH^- a una temperatura particular. El valor constituye la base para establecer la escala de pH, que mide la acidez o alcalinidad de una disolución acuosa; es decir, su concentración de iones H^+ o OH^- , respectivamente.
Radioactividad	La radiactividad es una reacción nuclear de "descomposición espontánea", es decir, un nucleido inestable se descompone en otro más estable que él, a la vez que emite una "radiación". El nucleido hijo (el que resulta de la desintegración) puede no ser estable, y entonces se desintegra en un tercero, el cual puede continuar el proceso, hasta que finalmente se llega a un núcleo estable. Se dice que los sucesivos nucleidos de un conjunto de desintegraciones forman una serie radiactiva o familia radiactiva.
Razón Aurea	Se trata de un número algebraico irracional (su representación decimal es infinita y no tiene periodo) que posee muchas propiedades interesantes y que fue descubierto en la Antigüedad, no como una expresión aritmética, sino como relación o proporción entre dos segmentos de una recta, es decir, una construcción geométrica. Esta proporción se encuentra tanto en algunas figuras geométricas como en la naturaleza: en las nervaduras de las hojas de algunos árboles,

	en el grosor de las ramas, en el caparazón de un caracol, en los flósculos de los girasoles, entre otros.
Vida media	Tiempo que tarda la actividad de una fuente en caer a la mitad de su valor original

ACERCA DE LOS AUTORES

Yomber José Montilla López es Profesor de Física graduado con honores egresado de la Universidad Pedagógica Experimental Libertador (Barquisimeto, Venezuela). Cursó estudios de Postgrado en la Universidad Centroccidental Lisandro Alvarado (Barquisimeto, Venezuela), donde obtuvo una Especialización en Física para la enseñanza y una Maestría en Ciencias Mención Física-Matemática (Msc.)



El Msc. Montilla ha sido profesor en el área Física y Matemáticas en Universidad Pedagógica Experimental Libertador en la carrera de Física y actualmente labora en la Universidad Técnica Estatal de Quevedo (Quevedo, Ecuador) en la carrera de Ingeniería Ambiental.

Angelita Leonor Bosquez Mestanza es Ingeniera en Sistemas egresada de la Universidad Técnica Estatal de Quevedo (Quevedo, Ecuador). Cursó estudios de Postgrado en la Universidad Nacional de Educación (Azogues, Ecuador) donde obtuvo una Maestría en Educación Mención en la Enseñanza de la Matemática (Msc).



La Msc. Bosquez ha sido profesora en el área de Física y Matemáticas en diversos planteles de educación media y actualmente labora en la Universidad Técnica Estatal de Quevedo (Quevedo, Ecuador) en la carrera de Ingeniería Ambiental



Dr. EDUARDO DÍAZ OCAMPO, Ph.D.

RECTOR

Ing. YENNY GUISELLI TORRES NAVARRETE, Ph.D.

VICERRECTORA ACADÉMICA

Ing. BOLÍVAR ROBERTO PICO SALTOS, M.Sc.

VICERRECTOR ADMINISTRATIVO

Econ. CARLOS EDISON ZAMBRANO, Ph.D.

DIRECTOR DE INVESTIGACIÓN - DICYT

ISBN: 978-9978-371-52-7



9 789978 371527




www.uteq.edu.ec