

Febrero 2013

Grado en Química

Examen Cálculo Numérico y Estadística Aplicada / 1 semana

Indicaciones de resolución (Luis M Sesé, Coordinador CNyEA)

1S/P.1 (p. 41, 156, 157, 192, 193...)

A)

$$\mu = 3 \tanh x = 3 \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

hay que tabular para $0 \leq x \leq 1$ con 0.1 de espaciado

x	0	0.1	0.2	...	0.4	0.5	0.6	...	1
μ	0	0.299004	0.592126	...	1.139847	1.386351	1.611149	...	2.284782

B) Con los datos de $x = 0.4$ ($k = 0$), 0.5 ($k = 1$) y 0.6 ($k = 2$), $x = 0.55 \rightarrow k = 1.5$

Un polinomio de Newton de segundo grado que empiece en $x = 0.4$ ($k = 0$) sirve para esta cuestión (texto pp. 40-42). Calculando las diferencias de avance con dichos tres datos

$$\mu(0.55) \approx p_{k=1.5} = 1.139847 + 0.246504 k - 0.021706 \frac{k(k-1)}{2} = 1.501463$$

El valor exacto es $\mu(0.55) = 1.501561$

C) El error absoluto es 9.8×10^{-5} , etc.

D) Derivadas:

Exacta= 2.359343

Stirling=

$$2.35651 = \frac{1.611149 - 1.139847}{2 \times 0.1}$$

Richardson= (hay que evaluar también la estimación de la derivada con las entradas en 0.3 y 0.7, texto p.158)

$$2.359376 = \frac{2.35651 - 0.5^2 \times 2.3479125}{1 - 0.5^2}$$

E) 3

1S/P.2

A) Integral de normalización: $N^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-\alpha x^2) dx = 1$

De tablas (o del texto p.301)

$$N = \left(\frac{4\alpha^3}{\pi} \right)^{1/4}$$

B) La probabilidad pedida es

$$P = 1 - p(-\sqrt{3} \leq x \leq \sqrt{3}) = 1 - \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\sqrt{3}}^{\sqrt{3}} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx$$

Una forma rápida es utilizar el desarrollo de Taylor con cinco términos para la exponencial (ver tablas o p.288 del texto) e integrar término a término

$$\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \approx 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{2}\right)^2 - \frac{1}{3!}\left(\frac{x^2}{2}\right)^3 + \frac{1}{4!}\left(\frac{x^2}{2}\right)^4$$

$$P = 0.38$$

1S/P.3 (p.325,326 del texto).

$$A) N \int_0^\infty \exp(-ax) dx = 1 \quad N = a \quad F(x) = 0 \text{ si } x < 0; \quad F(x) = 1 - \exp(-ax) \text{ si } x \geq 0$$

B) Media = desviación típica =

$$\frac{1}{a}$$

$$C) z_1 = 1 \quad z_2 = 5 \cdot 1 \pmod{32} = 5 \dots \quad z_5 = 5 \cdot 29 \pmod{32} = 17 \dots \quad (\text{texto p. 594})$$

$$y_1 = 1/32 \quad y_2 = 5/32 \dots\dots\dots$$

$$x_1 = -\frac{1}{2} \ln(1 - F(x_1)) = 0.015874 \quad \dots\dots \quad (\text{pp. 394-395 texto})$$

1S/P.4 Este problema se desarrolla idénticamente que el del texto en pp. 587-588. Valores propios

$$-1, 1, 5$$

Se conservan traza (5) y determinante (-5). Los vectores propios son ortonormales. El asociado con -1 es

$$\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \text{ etc.}$$

Examen Cálculo Numérico y Estadística Aplicada / 2 semana

Indicaciones de resolución (Luis M Sesé, Coordinador CNyEA)

2S/P1.

La ecuación inicial se reduce a la forma lineal en z y x haciendo los cambios y transformaciones siguientes (hay otras posibilidades igualmente válidas):

$$z = \frac{y + a}{x} = B + Cx; \quad y = ER^7; \quad x = \frac{1}{R^2}; \quad B = b; \quad C = -c$$

Se ajusta por mínimos cuadrados $z = B + Cx$. Esto significa que hay que tabular los valores de ambas variables

x	1	0.8858	0.7901	...
y	-5.4	-4.5859	-4.1053	...
z	-1.81	-1.1243	-0.6522	...

A partir de aquí sólo hay que introducir los datos (x, z) en la opción estadística de la calculadora para ajuste de regresión lineal. De ahí se obtienen los valores de los coeficientes del ajuste y el coeficiente de correlación lineal (-0.9991).

El error típico de la estima se calcula sumando las desviaciones cuadráticas de los valores z , (tabla y estimado), dividiendo por $5-2=3$, y calculando la raíz cuadrada. Está indicado cómo operar en p.431 del texto.

2S/2P.

Hay que hacer que el algoritmo sea exacto para $y(x) = 1, x, x^2, x^3$, pues hay cuatro coeficientes a determinar y harán falta cuatro ecuaciones (pp.164,165, 180-182 del texto).

$$y(x) = 1 \rightarrow \int_0^A 1 dt = a_0 \cdot 1 + a_1 \cdot 1 + a_2 \cdot 1 + a_3 \cdot 1 = A$$

$$y(x) = x \rightarrow \int_0^A x dt = a_0 \cdot 0 + a_1 \cdot \frac{A}{3} + a_2 \cdot \frac{2A}{3} + a_3 \cdot A = \frac{A^2}{2}$$

$$y(x) = x^2 \rightarrow \int_0^A x^2 dt = a_0 \cdot 0 + a_1 \cdot \left(\frac{A}{3}\right)^2 + a_2 \cdot \left(\frac{2A}{3}\right)^2 + a_3 \cdot A^2 = \frac{A^3}{3}$$

$$y(x) = x^3 \rightarrow \int_0^A x^3 dt = a_0 \cdot 0 + a_1 \cdot \left(\frac{A}{3}\right)^3 + \dots = \dots$$

Del sistema resultante se despejan los cuatro coeficientes. Con ellos se evalúa la función pedida para $A=2$

$$C(2) = a_0 \cos\left(\frac{\pi}{2} 0\right) + a_1 \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{4}{9}\right) + a_2 \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{16}{9}\right) + a_3 \cos\left(\frac{\pi}{2} 4\right) = \dots$$

Para discutir el resultado es de ayuda realizar un sencillo gráfico de la función a integrar y ver sobre el la influencia de los puntos seleccionados para la integración.

2S/P3.

Este problema involucra a una distribución Gaussiana. De hecho $c(x, t)/c_0$ es una densidad Gaussiana de probabilidades con media en $x = x_0$ y desviación típica $\sigma = \sqrt{2Dt}$. Se puede comprobar operando la normalización o por comparación con la Gaussiana convencional.

$$\frac{c(x, t)}{c_0} \equiv f(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right); \quad \text{con} \quad z = \frac{x - x_0}{\sqrt{2Dt}}$$

Una figura como la de la p. 362 del texto puede ayudar a visualizar todo lo que sigue.

De los datos del problema se deduce que $64/80 = 0.8$ es la fracción de materia que queda en $x_0 \pm 0.05$ (¡ ¡ ¡ metros!!!) una vez que pase el tiempo t que se pide. Los puntos tipificados son entonces

$$z_{\pm t} = \pm \frac{0.05}{\sqrt{2Dt}}; \quad z_{-t} = -z_t$$

0.8 es la probabilidad referida a esta variable tipificada de manera que

$0.8 = p(-z_t < z < z_t)$ = el intervalo es simétrico respecto del origen. El punto $z_t = 1.28167$, y hay que fijarse en que en una tabla de distribución gaussiana que dé áreas desde $-\infty$ hasta z_t : hay que buscar un área de 90% (ó probabilidad 0.9) para interpolar inversamente el valor z (una sencilla regla de tres es suficiente). La razón:

El intervalo es simétrico, luego:

Desde $-\infty$ hasta cero = 0.5

Desde cero hasta $z_t = 0.8/2 = 0.4$ total $0.5 + 0.4 = 0.9$

Utilizando ahora la definición de z_t se puede despejar el tiempo y calcularlo,

En este problema el tiempo es un parámetro, como en el problema 5.9 (pp.323, 331).

2S/P4.

Es un cálculo ANOVA-2 que se realiza siguiendo pp. 622 y 623 del texto (o el problema 10.12).

$$c = 3 \quad r = 4 \quad \bar{x} = \frac{47}{12} \quad B = \text{bloques} = \frac{115}{12} \quad \dots$$

Coeficientes críticos de comparación:

Bloques: $F_{3,6}(0.05) = 0.248$ Tratamientos: $F_{2,6}(0.05) = 1.251 \dots$

Hay que comparar con los F críticos que se toman de las tablas. Todas las medias son homogéneas, no hay influencia de ninguno de los dos factores.