

Control 3 MA-33A-1 2006-2

Profesor Dr. Gonzalo Hernandez - Auxiliar Gonzalo Rios

UChile - Departamento de Ingeniería Matemática

1) Ecuaciones No-Lineales:

En la molécula diatómica de la sal común, cloruro de sodio NaCl, el potencial de interacción entre los iones Na⁺ y Cl⁻ está dado por:

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V_0 e^{-\frac{r}{r_0}}$$

donde r es la distancia que los separa, q es la carga del protón, ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío, y V_0 y r_0 son constantes que dependen de la molécula. Los datos para la molécula NaCl son:

$$\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} = 14.4 [\text{\AA} \cdot \text{eV}] \quad V_0 = 1090 [\text{eV}] \quad r_0 = 0.33 [\text{\AA}]$$

Para que la molécula esté en equilibrio, la fuerza de interacción entre los iones debe ser cero, y se cumple la siguiente relación entre fuerza y potencial:

$$f(r) = -\frac{dV(r)}{dr}$$

Se desea encontrar la distancia entre los iones, cuando la molécula está en equilibrio. Para esto, sigamos los siguientes pasos (Para todo el problema, use una aritmética finita de 4 cifras significativas con redondeo):

- (a) Plantee el sistema no lineal a resolver. Compruebe la existencia de un cero dentro del intervalo $[2, 4]$
- (b) Se proponen dos métodos para obtener un punto inicial r_0 para aplicar el método de Newton.
 - i) El polinomio normalizado de aproximación por mínimos cuadrados de $f(r)$ en el intervalo $[2, 4]$ es:

$$p(x) = x^3 - 9.55x^2 + 29.9x - 30.6$$

Se desea aproximar las raíces de $f(r)$ por las raíces reales de $p(x)$. Haga 2 iteraciones del método de Graeffe aplicado al polinomio $p(x)$, y de las tres raíces obtenidas, quédese con aquella que hace a $f(r)$ más cercano a cero. Llame a este punto inicial r_1 .

Obs: $(x^3 + ax^2 + bx + c)(-x^3 + ax^2 - bx + c) = -x^6 + (a^2 - 2b)x^4 + (2ac - b^2)x^2 + c^2$

- ii) Haga 2 iteraciones con el método de la Bisección, y luego quédese con el punto medio del intervalo encontrado. Llame a este punto inicial r_2 .
- (c) Aplicando el método de Newton
 - i) Haga 1 iteración del método de Newton a partir de r_1 . Llame a este resultado d_1 .
 - ii) Haga 1 iteración del método de Newton a partir de r_2 . Llame a este resultado d_2 .
- (d) Determine el número de operaciones para calcular r_1 y r_2 . Compare la precisión de las soluciones d_1 y d_2 .

2) Modelación en Optimización:

Suponga que una compañía produce un producto para satisfacer una demanda conocida y que la producción debe ser determinada en T períodos. La producción se puede hacer con fuerza laboral estable o temporal. Las variables del modelo son: cantidad de producto producido (fuerza laboral estable), niveles de inventario y cantidad de fuerza laboral temporal. La función objetivo y restricciones consideran:

- i) Función Objetivo: Costo de producción, inventario y de trabajo temporal (Para evitar fluctuaciones el costo es proporcional al cuadrado de la diferencia en la fuerza de trabajo temporal entre dos períodos sucesivos)
- ii) Restricciones: Balance de demanda y capacidad máxima de producción b .

Los datos del problema son: nivel de inventario inicial I_0 , fuerza de trabajo temporal inicial L_0 y demanda d_k conocida durante el período k . Sea p es el número de unidades producidas por unidad de fuerza de trabajo temporal durante cualquier período.

Determine un modelo matemático que entregue la cantidad de producto producido, nivel de inventario y fuerza de trabajo temporal durante los T períodos, de manera que las restricciones sean satisfechas y el costo total sea minimizado.

3) Integración:

En la Cuadratura de Gauss Chebyshev consideramos el caso de la regla de tres nodos en $[-1, 1]$:

$$I(f) = \int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \omega_{-1}f(x_{-1}) + \omega_0f(x_0) + \omega_1f(x_1)$$

Los parámetros x_i y ω_i (6 en total), se eligen de modo que $I(f)$ sea exacta para polinomios de grado $2n - 1 = 5$. Esto genera el siguiente sistema de ecuaciones no lineales:

$$\begin{aligned} f(x) = 1 &\Rightarrow \omega_{-1} \cdot 1 + \omega_0 \cdot 1 + \omega_1 \cdot 1 = \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \pi \\ f(x) = x &\Rightarrow \omega_{-1}x_{-1} + \omega_0x_0 + \omega_1x_1 = \int_{-1}^1 \frac{x dx}{\sqrt{1-x^2}} = 0 \\ f(x) = x^2 &\Rightarrow \omega_{-1}x_{-1}^2 + \omega_0x_0^2 + \omega_1x_1^2 = \int_{-1}^1 \frac{x^2 dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{\pi}{2} \\ f(x) = x^3 &\Rightarrow \omega_{-1}x_{-1}^3 + \omega_0x_0^3 + \omega_1x_1^3 = \int_{-1}^1 \frac{x^3 dx}{\sqrt{1-x^2}} = 0 \\ f(x) = x^4 &\Rightarrow \omega_{-1}x_{-1}^4 + \omega_0x_0^4 + \omega_1x_1^4 = \int_{-1}^1 \frac{x^4 dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{3\pi}{8} \\ f(x) = x^5 &\Rightarrow \omega_{-1}x_{-1}^5 + \omega_0x_0^5 + \omega_1x_1^5 = \int_{-1}^1 \frac{x^5 dx}{\sqrt{1-x^2}} = 0 \end{aligned}$$

Dada la simetría del problema, es razonable hacer el siguiente Ansatz:

$$x_0 = 0 \quad -x_{-1} = x_1 = \lambda \quad \omega_0 = \alpha \quad \omega_{-1} = \omega_1 = \beta$$

(a) Demuestre que aplicando el Ansatz, el sistema anterior se reduce a:

$$2\beta + \alpha = \pi \quad 2\beta\lambda^2 = \frac{\pi}{2} \quad 2\beta\lambda^4 = \frac{3\pi}{8}$$

y obtenga su solución.

(b) Considere $f(x) = \frac{1}{1+x^4}$. Con esto:

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{1}{1+x^4} dx$$

- i) Calcule $I(f)$ mediante Cuadratura de Chebyshev.
- ii) Calcule $I(f)$ mediante Simpson Compuesto ($n = 6$).
- (c) Si el valor exacto es $I(f) = 1.7339460$, compare los métodos de Cuadratura de Chebyshev y Simpson Compuesto, en cuanto a precisión, facilidad de aplicación y cantidad de operaciones.

Respuestas:

1) Ecuaciones No-Lineales

- (a) Plantear el sistema y existencia de la raíz

$$f(r) = 0 \iff \frac{dV(r)}{dr} = 0$$

$$\implies V(r) = -\frac{14.4}{r} + 1090 \times e^{-\frac{r}{0.33}}$$

$$\implies f(r) = -\frac{dV(r)}{dr} = -\frac{14.4}{r^2} + 3303 \times e^{-\frac{r}{0.33}}$$

$$(*) \boxed{\frac{14.4}{r^2} - 3303 \times e^{-\frac{r}{0.33}} = 0}$$

$$f(2) = -\frac{14.4}{2^2} + 3303 \times e^{-\frac{2}{0.33}} = -3.6 + 3303 \times e^{-6.061} = -3.6 + 3303 \times 0.002332 = 4.103$$

$$f(4) = -\frac{14.4}{4^2} + 3303 \times e^{-\frac{4}{0.33}} = -0.9 + 3303 \times 0.000005443 = -0.882$$

$$\text{como } f(2) > 0 \text{ y } f(4) < 0 \implies \exists \bar{x} \in (2, 4) \text{ tal que } f(\bar{x}) = 0$$

Forma alternativa:

$$g(x) = x + \frac{14.4}{x^2} - 3303 \times e^{-\frac{x}{0.33}}$$

$$g(2) = 2 - 4.103 = -2.103$$

$$g(4) = 4 + 0.882 = 4.882$$

$$\text{como } g(2) < 2 \text{ y } g(4) > 4 \implies \exists \bar{x} \in (2, 4) \text{ tal que } g(\bar{x}) = \bar{x}$$

- (b) Encontrar punto inicial

- i) Aproximar la raíz por mínimos cuadrados y Graeffe

A. $p_1(x) = p(x) = x^3 - 9.55x^2 + 29.9x - 30.6$

$$a_1 = -9.55, b_1 = 29.9, c_1 = -30.6$$

$$a^2 - 2b = 9.55^2 - 2 \times 29.9 = 31.4$$

$$2ac - b^2 = 2 \times 30.6 \times 9.55 - 29.9^2 = 584.5 - 894 = -309.5$$

$$c^2 = 30.6^2 = 936.4$$

B. $p_2(x) = -x^3 + 31.4x^2 - 309.5x + 936.4$

$$a_2 = 31.4, b_2 = -309.5, c_2 = 936.4$$

$$a^2 - 2b = 31.4^2 + 2 \times 309.5 = 986 + 619 = 1605$$

$$2ac - b^2 = 2 \times 31.4 \times 936.4 - 309.5^2 = 5881 - 9579 = -3690$$

$$c^2 = 936.4^2 = 876800$$

C. $p_3(x) = -x^3 + 1605x^2 - 3690x + 876800$

$$y_1 = 1605 \implies x_1 = \sqrt[6]{1605} = 3.422$$

$$y_2 = \frac{3690}{1605} = 2.299 \implies x_2 = \sqrt[6]{2.299} = 1.149$$

$$y_3 = \frac{876800}{3690} = 237.6 \implies x_3 = \sqrt[6]{237.6} = 2.489$$

D. $f(3.422) = -\frac{14.4}{3.422^2} + 3303 \times e^{-\frac{3.422}{0.33}} = -1.126098240698252233$

$$f(1.149) = -\frac{14.4}{1.149^2} + 3303 \times e^{-\frac{1.149}{0.33}} = 90.6646042208788557$$

$$f(2.489) = -\frac{14.4}{2.489^2} + 3303 \times e^{-\frac{2.489}{0.33}} = -0.57345335313532490549$$

$$\implies \boxed{r_1 = 2.489}$$

- ii) Método de la Bisección

A. $f(2) = 4.103 > 0$

$$f(4) = -0.882 < 0$$

B. $\frac{2+4}{2} = 3$

$$f(3) = -\frac{14.4}{3^2} + 3303 \times e^{-\frac{3}{0.33}} = -1.228 < 0$$

C. $\frac{3+2}{2} = 2.5$

$$f(2.5) = -\frac{14.4}{2.5^2} + 3303 \times e^{-\frac{2.5}{0.33}} = -0.61044672782066220821 < 0$$

D. $\frac{2+2.5}{2} = 2.25$

$$\implies \boxed{r_2 = 2.25}$$

(c) Método de Newton

$$f(r) = -\frac{14.4}{r^2} + 3303 \times e^{-\frac{r}{0.33}}$$

$$\frac{df(r)}{dr} = \frac{28.8}{r^3} - 10010 \times e^{-\frac{r}{0.33}}$$

$$g(r) = r - \frac{-\frac{14.4}{r^2} + 3303 \times e^{-\frac{r}{0.33}}}{\frac{28.8}{r^3} - 10010 \times e^{-\frac{r}{0.33}}}$$

i) $r_1 = 2.489$

A. $-\frac{14.4}{r^2} = -\frac{14.4}{2.489^2} = -\frac{14.4}{6.195} = -2.324$

B. $-\frac{r}{0.33} = -\frac{2.489}{0.33} = -7.542$

C. $e^{-\frac{r}{0.33}} = e^{-7.542} = 0.0005303$

D. $3303 \times e^{-\frac{r}{0.33}} = 3303 \times 0.0005303 = 1.752$

E. $-\frac{14.4}{r^2} + 3303 \times e^{-\frac{r}{0.33}} = -2.324 + 1.752 = -0.572$

F. $\frac{28.8}{r^3} = \frac{28.8}{2.489^3} = \frac{28.8}{15.42} = 1.868$

G. $10010 \times e^{-\frac{r}{0.33}} = 10010 \times 0.0005303 = 5.308$

H. $\frac{28.8}{r^3} - 10010 \times e^{-\frac{r}{0.33}} = 1.868 - 5.308 = -3.44$

I. $\frac{-\frac{14.4}{r^2} + 3303 \times e^{-\frac{r}{0.33}}}{\frac{28.8}{r^3} - 10009 \times e^{-\frac{r}{0.33}}} = \frac{-0.572}{-3.44} = 0.1663$

J. $g(r_1) = 2.489 - 0.1663 = 2.323$

K. $\Rightarrow \boxed{d_1 = 2.323}$

ii) $r_2 = 2.25$

A. $-\frac{14.4}{r^2} = -\frac{14.4}{2.25^2} = -\frac{14.4}{5.063} = -2.844$

B. $-\frac{r}{0.33} = -\frac{2.25}{0.33} = -6.818$

C. $e^{-\frac{r}{0.33}} = e^{-6.818} = 0.001094$

D. $3303 \times e^{-\frac{r}{0.33}} = 3303 \times 0.001094 = 3.613$

E. $-\frac{14.4}{r^2} + 3303 \times e^{-\frac{r}{0.33}} = -2.844 + 3.613 = 0.769$

F. $\frac{28.8}{r^3} = \frac{28.8}{2.25^3} = \frac{28.8}{11.39} = 2.529$

G. $10010 \times e^{-\frac{r}{0.33}} = 10010 \times 0.001094 = 10.95$

H. $\frac{28.8}{r^3} - 10010 \times e^{-\frac{r}{0.33}} = 2.529 - 10.95 = -8.421$

I. $\frac{-\frac{14.4}{r^2} + 3303 \times e^{-\frac{r}{0.33}}}{\frac{28.8}{r^3} - 10009 \times e^{-\frac{r}{0.33}}} = \frac{0.769}{-8.421} = -0.09132$

J. $g(r_2) = 2.25 + 0.09132 = 2.341$

K. $\Rightarrow \boxed{d_2 = 2.341}$

(d) Comparación de los resultados

i) Número de Operaciones

$$evalf = 6 \text{ ops}$$

A. $r_1 : 2(9) + 2 + 3 + 3evalf = 23 + 3 \times 6 = 41$

B. $r_2 : 6 + 4evalf = 6 + 4 \times 6 = 30$

ii) Precisión

A. $E_{abs}(d_1) = |f(d_1) - 0| = f(2.323) = 0.2271$

B. $E_{abs}(d_2) = |f(d_2) - 0| = f(2.341) = 0.1143$

iii) Conclusión

El segundo método, utilizando Bisección, es menos costoso en número de operaciones que el método de Graeffe, y la solución entregada fue mejor punto inicial, por lo que el primer método es más eficiente.

2) Modelación

Los datos del problema son: nivel de inventario inicial I_0 , fuerza de trabajo temporal inicial L_0 y demanda d_k conocida durante el período k . Sea p es el número de unidades producidas por unidad de fuerza de trabajo temporal durante cualquier período.

Determine un modelo matemático que entregue la cantidad de producto producido, nivel de inventario y fuerza de trabajo temporal durante los T períodos, de manera que las restricciones sean satisfechas y el costo total sea minimizado.

Definamos las variables:

x_k : cantidad de producto producido en la etapa $k = 1, \dots, T$

y_k : nivel de inventario al final de la etapa $k = 0, \dots, T$

z_k : cantidad de fuerza laboral temporal en la etapa $k = 0, \dots, T$

Con estas variables, la función objetivo es:

$$f(x_1, \dots, x_T, y_1, \dots, y_T, z_1, \dots, z_T) = \sum_{k=1}^T [\alpha_k x_k + \beta_k y_k + \delta_k (z_k - z_{k-1})^2]$$

El primer término en f es el costo lineal de producción, el segundo término es el costo lineal de inventario y el tercer término es el costo no-lineal de fuerza laboral temporal. Las constantes $\alpha_k, \beta_k, \delta_k$ son las constantes de costos.

Las restricciones son:

i) Balance de demanda:

$$x_k + y_{k-1} - y_k + pz_k = d_k \quad \forall k = 1, \dots, T$$

ii) Capacidad máxima de producción:

$$x_k \leq b \quad \forall k = 1, \dots, T$$

iii) Inventario inicial:

$$y_0 = I_0$$

iv) Fuerza de trabajo temporal inicial:

$$z_0 = L_0$$

3) Integración

(a) El Ansatz: $x_0 = 0, -x_{-1} = x_1 = \lambda, \omega_0 = \alpha, \omega_{-1} = \omega_1 = \beta$

$$\omega_{-1} + \omega_0 + \omega_1 = \pi \implies \alpha + 2\beta = \pi \quad (*)$$

$$\omega_{-1}x_{-1}^2 + \omega_0x_0^2 + \omega_1x_1^2 = \frac{\pi}{2} \implies \beta\lambda^2 + \beta\lambda^2 = \frac{\pi}{2} \quad (**)$$

$$\omega_{-1}x_{-1}^4 + \omega_0x_0^4 + \omega_1x_1^4 = \frac{3\pi}{8} \implies \beta\lambda^4 + \beta\lambda^4 = \frac{3\pi}{8} \quad (***)$$

$$\text{dividiendo } (***) \text{ por } (**) \implies \lambda^2 = \frac{3}{4} \implies \lambda = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$\text{reemplazando en } (**) \implies 2\beta\frac{3}{4} = \frac{\pi}{2} \implies \beta = \frac{\pi}{3}$$

$$\text{reemplazando en } (*) \implies \alpha + 2\frac{\pi}{3} = \pi \implies \alpha = \frac{\pi}{3}$$

$$(b) I(f) = \int_{-1}^1 f(x)dx = \int_{-1}^1 \frac{1}{1+x^4}dx$$

i) Cuadratura de Gauss Chebyshev

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{f(x)}{w(x)} w(x) dx = \int_{-1}^1 h(x) w(x) dx, \text{ donde } w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \text{ y } h(x) = \frac{\sqrt{1-x^2}}{1+x^4}$$

Aplicando cuadratura de Gauss Chebyshev

$$\begin{aligned} \Rightarrow I(f) &= \int_{-1}^1 h(x) w(x) dx \simeq \omega_{-1} h(x_{-1}) + \omega_0 h(x_0) + \omega_1 h(x_1) = \frac{\pi}{3} \left(h\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + h(0) + h\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \right) \\ &= \frac{\pi}{3} \left(\frac{\sqrt{1-\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2}}{1+\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^4} + \frac{\sqrt{1-0^2}}{1+0^4} + \frac{\sqrt{1-\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2}}{1+\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^4} \right) = \frac{\pi}{3} \left(2 \frac{\sqrt{1-\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2}}{1+\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^4} + 1 \right) = \frac{\pi}{3} \left(2 \frac{\sqrt{1-\frac{3}{4}}}{1+\frac{9}{16}} + 1 \right) \\ &= \frac{\pi}{3} \left(32 \frac{\sqrt{\frac{1}{4}}}{25} + 1 \right) = \frac{\pi}{3} \left(\frac{32}{50} + 1 \right) = \frac{41}{75} \pi = 1.7174 \end{aligned}$$

ii) Simpson Compuesto $n = 6 \Rightarrow h = \frac{1+1}{6} = \frac{1}{3}$

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_{-1}^1 f(x) dx \simeq \frac{1}{9} [f(-1) + 4f(-\frac{2}{3}) + 2f(-\frac{1}{3}) + 4f(0) + 2f(\frac{1}{3}) + 4f(\frac{2}{3}) + f(1)] \\ &= \frac{1}{9} \left[\frac{1}{1+(-1)^4} + 4 \frac{1}{1+(-\frac{2}{3})^4} + 2 \frac{1}{1+(-\frac{1}{3})^4} + 4 \frac{1}{1+(0)^4} + 2 \frac{1}{1+(\frac{1}{3})^4} + 4 \frac{1}{1+(\frac{2}{3})^4} + \frac{1}{1+(1)^4} \right] \\ &= \frac{1}{9} \left[\frac{2}{1+1} + \frac{8}{1+\frac{16}{81}} + \frac{4}{1+\frac{1}{81}} + 4 \right] \\ &= \frac{1}{9} \left[1 + \frac{648}{97} + \frac{162}{41} + 4 \right] \\ &= \frac{1}{9} \left[\frac{62167}{3977} \right] : \\ &= \frac{15.63}{9} = 1.737 \end{aligned}$$

(c) Comparación de los métodos: $I = 1.7339460$

i) Precisión

$$\begin{aligned} E_{abs}(\text{Gauss}) &= |1.7174 - 1.7339460| = 0.016546 \\ E_{rel}(\text{Gauss}) &= \frac{|1.7174 - 1.7339460|}{1.7339460} = 0.009542 \\ E_{abs}(\text{Simpson}) &= |1.737 - 1.7339460| = 0.003054 \\ E_{rel}(\text{Simpson}) &= \frac{|1.737 - 1.7339460|}{1.7339460} = 0.001761 \\ \frac{E_{abs}(\text{Gauss})}{E_{abs}(\text{Simpson})} &= \frac{0.016546}{0.003054} = 5.4 \end{aligned}$$

ii) Facilidad de aplicación

El método de Gauss solo necesita 3 evaluaciones, mientras que el de Simpson necesitaba 7 evaluaciones, por lo que es menos trabajo usar el método de Gauss

iii) Cantidad de operaciones

$$\text{Gauss: } 3 \times 9 + 2 + 2 = 31$$

$$\text{Simpson: } 6 \times 7 + 5 + 7 = 54$$

iv) La solución entregada por el método de Simpson es más precisa que la solución entregada por el método de Gauss, claro que esto se debe por la cantidad de puntos tomados, ya que en Simpson fueron 7 puntos, mientras que en Gauss solo fueron 3. Seguramente, si aplicamos el método de Gauss con 7 puntos, la solución entregada sería mucho mejor que la de Simpson con 7 puntos.