

# OPERACIONES MATEMÁTICAS BÁSICAS

---

## Aspectos teóricos

1. Derive la fórmula de “5 puntos” para la derivación numérica
2. Deduzca la generalización de la regla de Simpson.
3. Dada la siguiente integral:

$$\int_1^b x^{-2} g(x) dx$$

donde  $g(x)$  es una función que tiende a un valor constante para grandes valores de  $x$ , realice un cambio de variables que la transforme en una expresión más adecuada para su evolución numérica, cuando  $b$  toma valores muy grandes.

4. Escriba las ecuaciones utilizadas en el método de Newton-Raphson y el de la secante.
5. Suponga que usted desea ajustar la función  $f(x; a_1, a_2, \dots, a_k)$  con parámetros  $a_1, a_2, \dots, a_k$  a partir de un conjunto de puntos  $\{x_i, y_i\}$  con  $i = 1, \dots, N$ . Escriba formalmente la función a minimizar en base al método de los cuadrados mínimos.

## Ejercicios de programación

1. Escriba un programa en lenguaje FORTRAN de simple precisión para evaluar la derivada de la función  $\text{sen}(x)$  en el intervalo  $[0, 2\pi]$  para diferentes valores del incremento finito  $h$ . Estudie la influencia del mismo sobre el error numérico en la derivada. Cambie la precisión de su programa a “doble precisión” (**real\*8**) y compare los nuevos resultados con los obtenidos en el paso anterior. Analice el error según la zona del dominio, y si es posible, con diferentes aproximaciones para la derivada.
2. Escriba un programa en FORTRAN para evaluar la integral definida de la función  $\text{cos}(x)$  en el intervalo  $[0, 1]$ , para distintas particiones del intervalo. Estudie el efecto del aumento en el número de particiones del intervalo sobre el error numérico.
3. Escriba un programa en FORTRAN para encontrar las raíces de la función  $f(x) = x^2 - 5$ . Analice el número de iteraciones necesario para lograr la convergencia para distintos valores de tolerancia, y para distintos métodos de búsqueda.

4. Use la subrutina **simplex.f** para encontrar la distancia interatómica de equilibrio de la molécula NaCl a partir del siguiente potencial de interacción entre los iones:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} + \alpha \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right)$$

siendo  $e^2 = 14,4$  (eV·Å),  $\alpha = 1,09 \cdot 10^3$  (eV) y  $\rho = 0,33$  (Å).

5. Use la subrutina **simplex.f** para ajustar la función  $f(x, a_1, a_2) = e^{-a_1 x} + e^{-a_2 x}$  al conjunto de datos que se encuentra en el archivo **datos.txt**. Tenga en cuenta el ejercicio 5 de la parte teórica. (Sugerencia: buscar los valores de  $a_1$  y  $a_2$  en el intervalo  $[0,1]$ ).