Metodos Numericos

Adolfo Hernández Ramírez

Primer exámen parcial Métodos Numéricos

26 de Septiembre 2025

1. (2 puntos) Explica claramente los siguientes conceptos, y la diferencia entre ellos. :
   (a) Error de truncamiento y error de redondeo.
   (b) Exactitud y Precisión.
   (c) Error de modelado y error de medición.

2. (2 puntos) Considera la función $f(x) = x = x - e^{-x^2}$.
   (a) (2 puntos) Realiza tres iteraciones del **método de punto fijo**, usando $g(x) = \sqrt{-\ln(x)}$ para el valor inicial $x_0 = 0.5$. Determina si la raíz está convergiendo o no.
   (b) Define otra función $g(x)$ y nuevamente realiza 3 iteraciones. En este caso ¿la solución converge o no? ¿Cómo se determina si el método converge o no, sin necesidad de realizar las iteraciones explicitamente?

3. (2 puntos) La ecuación para la constante de equilibrio de una reacción química implica resolver:

$$f(x) = \cos(x) - x = 0$$

   Usa el **método de Newton–Raphson** con valor inicial $x_0 = 0.5$:
   (a) Explica en qué consiste el método.
   (b) Realiza **dos iteraciones**. Reporta el error relativo.
   (c) Compara la aproximación después de dos iteraciones con la raíz verdadera (≈ 0.7391). Reporta el error absoluto.

4. (2 puntos) Para el ejercicio anterior realiza 2 iteraciones para el método de bisección y 2 para el método de la falsa posición. ¿Cuál de los métodos converge más rápido?

5. (2 puntos) Considera la función

$$f(x) = e^x \cos(x).$$

   (a) Encuentra el polinomio de Taylor de orden 3 de $f(x)$ alrededor de $x = 0$.
   (b) Usa este polinomio para aproximar $f(0.5)$.
   (c) Calcula el error verdadero comparando con el valor exacto de $f(0.5)$.
   (d) ¿Cuál es el error aproximado de truncamiento? Tip: Usa el término del residuo.

6. (1 punto extra) En tus propias palabras, ¿por qué son importantes los métodos numéricos en química y en otras ciencias? Da un ejemplo donde una solución analítica sea difícil o imposible, y los métodos numéricos resulten útiles.

METODOS NUMERICOS
PRIMER EXAMEN PARCIAL
Adolfo Hernández Ramírez

Ejercicio 1

a) Error Truncamiento y Redondeo.

Error Truncamiento

Representa la diferencia que existe entre una formulación matemática de un problema y la aproximación que se obtiene con un método numérico

Error Redondeo

Este error se presenta cuando la computadora o cualquier herramienta de cálculo, solo representa las cantidades con un número finito de dígitos.

Diferencias

Truncamiento
→ Surge de aproximar un modelo matemático

Redondeo
→ Surge de aproximar los números durante el cálculo.

b) Exactitud y Precisión

Exactitud → Se refiere a que tan cercano está el valor calculado o medido del valor verdadero

Precisión → Se refiere a que tan cercanos se encuentran entre sí, los valores o datos calculados / medidos.

c) Error modelado y Medición

Error Modelado

El error surge a partir de las diferencias que surgen entre las predicciones de un modelo y la realidad, es causado por las simplificaciones y suposiciones que se originan al crear el modelo

Error Medición

Es el error asociado a la diferencia entre el valor medido de una cantidad física y su verdadero valor y surge por las limitaciones o imprecisiones del instrumento de medición, el observador ó las condiciones del entorno que afectan el proceso de medición.

Diferencias

Modelado → Surge por simplificar la realidad de un fenomeno físico / químico.

Medición → Surge por la imprecisión en la medición de los datos.

Ejercicio 2. Inciso a).

$f(x) = x - e^{-x^2}$. Usando $g(x) = \sqrt{-\ln(x)}$ y $x_0 = 0.5$

1ra Iteración

$x_1 = g(x_0) = \sqrt{-\ln(x_0)}$

$x_1 = \sqrt{-\ln(0.5)} = 0.8325$

$$\varepsilon_a = \left|\frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}}\right| \times 100\%$$

$$\varepsilon_a = \left|\frac{0.8325 - 0.5}{0.8325}\right| \times 100\% = 39.94\%$$

2da Iteración

$x_2 = g(x_1)$

$x_2 = \sqrt{-\ln(0.8325)} = 0.4281$

$$\varepsilon_a = \left|\frac{0.4281 - 0.8325}{0.4281}\right| \times 100\%$$

$\varepsilon_a = 90.02\%$

3ra Iteración

$x_3 = g(x_2) = \sqrt{-\ln(0.4281)}$

$x_3 = 0.9210$

$$\varepsilon_a = \left|\frac{0.9210 - 0.4281}{0.9210}\right| \times 100\%$$

$\varepsilon_a = 53.51\%$

Resumen Iteraciones

$x_0 = 0.5$
$x_1 = 0.8325$
$x_2 = 0.4281$
$x_3 = 0.9210$

En el método de punto fijo con tres iteraciones la raíz no converge, ya que analizando los valores de x, nos damos cuenta que dichos valores oscilan sin estabilizarse y que con cada iteración el rango donde se encuentra la raíz aumenta y el valor de x aproximado se aleja de la raíz.

Ejercicio 2. Inciso B).

Si $f(x) = x - e^{-x^2}$ yo propongo que $g(x) = e^{-x^2}$

1ra Iteración

$x_1 = g(x_0) = e^{-(0.5)^2} = 0.7788$

$$\varepsilon_a = \left|\frac{0.7788 - 0.5}{0.7788}\right| \times 100\% =$$

$\varepsilon_a = 35.79\%$

2da Iteración

$x_2 = g(x_1) = e^{-(0.7788)}$

$x_2 = 0.5452$

$$\varepsilon_a = \left|\frac{0.5452 - 0.7788}{0.5452}\right| \times 100\%$$

$\varepsilon_a = 42.84\%$

3ra Iteración

$x_3 = g(x_2) = e^{-(0.5452)}$

$x_3 = 0.7428$

$$\varepsilon_a = \left|\frac{0.7428 - 0.5452}{0.7428}\right| \times 100\%$$

$\varepsilon_a = 26.60\%$

Resumen Iteraciones.

$x_0 = 0.5$
$x_1 = 0.7788$
$x_2 = 0.5452$
$x_3 = 0.7428$

La solución si está convergiendo ya que si bien los valores oscilan un poco, se puede observar como el error está disminuyendo además que con los valores obtenidos se aprecia que la solución está en el rango de $x = [0.5452, 0.7428]$ y que con cada iteración dicho rango se va acortando y generando que los valores de x se acerquen entre sí hasta encontrar la raíz.

→ Continuación Ejercicio 2.

Sí, se puede determinar sí el método converge con el criterio del punto fijo.

Si $|g'(x^*)| < 1$ → Convergencia local garantizada

Si $|g'(x^*)| > 1$ → El método diverge

Si $|g'(x^*)| = 1$ → El criterio no concluye.

Para el inciso a)

$$g'(x) = \frac{d}{dx}\left((-\ln(x))^{1/2}\right)$$

$$g'(x) = \frac{1}{2}(-\ln(x))^{-1/2} \cdot \frac{d}{dx}(-\ln(x))$$

$$g'(x) = \frac{1}{2\sqrt{-\ln(x)}}\left(-\frac{1}{x}\right)$$

$$g'(x) = -\frac{1}{2x\sqrt{-\ln(x)}}$$

$$|g'(x)| = \left|-\frac{1}{2x\sqrt{-\ln(x)}}\right|$$

$$|g'(x_c)| = \left|\frac{-1}{2(0.9281)\sqrt{-\ln(0.9281)}}\right|$$

$$|g'(x_2)| = \left|\frac{-1}{0.7886}\right| = 1.2680 > 1$$

∴ El método diverge

Para inciso b)

$$g'(x) = \frac{d}{dx}(e^{-x^2}) = e^{-x^2}\frac{d}{dx}(-x^2)$$

$$g'(x) = -2xe^{-x^2}$$

$$|g'(x)| = |-2xe^{-x^2}|$$

$$|g'(0.5452)| = |-2(0.5452)e^{-(0.5902)^2}|$$

$$|g'(x_c)| = 0.810 > 1$$

∴ El método efectivamente converge.

Ejercicio 3.

$$f(x) = \cos(x) - x = 0$$

$$x_0 = 0.8$$

a) El método consiste en usar una estimación inicial y en cada paso se traza la recta tangente a la función en ese punto y se toma ese punto como una nueva aproximación el punto donde está tangente corta al eje x. Esto se repite cada vez hasta que nos acerquemos a la raíz verdadera gracias a que se aprovecha la información de la primera derivada presente en la siguiente ecuación

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

b) **1ra Iteración**

$$X_i = X_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

$f'(x) = -\text{Sen}(x) - 1$

$f'(x_0) = -\text{Sen}(0.5) - 1 = -1.4794$

$f(x_0) = \cos(0.5) - 0.5 = 0.3776$

$$x_1 = 0.5 - \frac{0.3776}{-1.4794} = 0.5 + 0.2552$$

$x_1 = 0.7552$

$$E_v = \left|\frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}}\right| = \left|\frac{0.7552 - 0.5}{0.7552}\right|$$

$E_v = 0.3379$

2da Iteración

$$X_2 = X_1 + \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

$f(x_1) = \cos(0.7552) - 0.7552$

$f(x_1) = -0.0270.$

$f'(x_1) = -\text{Sen}(0.7552) - 1$

$f'(x_1) = -1.6854$

$$X_2 = 0.7552 - \frac{-0.0270}{-1.6854}$$

$X_2 = 0.7552 - 0.0160$

$X_2 = 0.7392$

$$E_v = \left|\frac{0.7392 - 0.7552}{0.7392}\right| = 0.0216$$

c) Error absoluto

$$E_{Abs} = |X_r - X_a| = |0.7391 - 0.7392| = 0.0001$$

donde $X_r = 0.7391$

Ejercicio 4

Metodo Bisección

Para los intervalos consideramos $a = 0.5$ y $b = 1$

$f(0.5) = \cos(0.5) - 0.5 = 0.3775$

$f(1) = \cos(1) - 1 = -0.4596$

$f(a) \cdot f(b) < 0 \rightarrow$ Garantizamos que la raíz esta en este intervalo

$$K = \frac{a+b}{2} = \frac{0.5+1}{2} = 0.75$$

$f(K) = \cos(0.75) - 0.75 = -0.0183.$

$f(a) \cdot f(K) \not< 0 \quad \therefore \quad a = a$

$b = c.$

2^{da} Iteracion

$$K = \frac{0.5 + 0.75}{2} = 0.625$$

$$f(K) = \cos(0.625) - 0.625 = 0.1889$$

METODO FALSA POSICION

Usando los mismos intervalos $[a,b] = [0.5, 1]$

$$X_r = b - \frac{f(b)(a-b)}{f(a) - f(b)}$$

1^{ra} Iteración

$$f(a) = \cos(0.5) - 0.5 = 0.3775$$
$$f(b) = \cos(1) - 1 = -0.4596$$

~~Xr = 2 0.4596~~

$$X_r = 1 - \frac{(-0.4596)(0.5-1)}{0.3775 - (-0.4596)}$$

$$X_r = 1 - \frac{(-0.4596)(-0.5)}{0.8371}$$

$$X_r = 1 - \frac{0.2298}{0.8371} = 1 - 0.2745$$

$$X_r = 0.7255$$

$$f(X_r) = \cos(0.7255) - 0.7255 = 0.0226$$

$$f(a) \cdot f(X_r) > 0 \quad \therefore \quad a = X_r, \; b = b$$

2da Iteración

$$f(a) = 0.0226$$
$$f(b) = -0.4596$$

~~Xr = 1 - (-0.4596)(0.7255...~~

$$X_r = 1 - \frac{(-0.4596)(0.7255 - 1)}{0.0226 - (-0.4596)}$$

$$X_r = 1 - \frac{(-0.4596)(-0.2745)}{0.4822}$$

$$X_r = 1 - \frac{0.1261}{0.4822} = 1 - 0.2616$$

$$X_r = 0.7384$$

Sí consideramos que la raíz verdadera es 0.7391, podemos decir que el método de FALSA POSICION Converge más rapido ya que el valor X_r de la segunda iteración es muy cercano al valor de la raíz verdadera.

Ejercicio 5.

$$f(x) = e^x \cos(x).$$

a)

$$f(x=0.5) = f(0) + f'(0)(x_{i+1}-x_i) + \frac{f''(0)(x_{i+1}-x_i)^2}{2!} + \frac{f'''(0)(x_{i+1}-x_i)^3}{3!}$$

donde $h = x_{i+1} - x_i = 0.5 - 0 = 0.5$

$$\therefore \quad f(x=0.5) = f(0) + f'(0)(0.5) + \frac{f''(0)(0.5)^2}{2!} + \frac{f'''(0)(0.5)^3}{3!}$$

b)

$$f(x) = e^x \cos(x)$$

$$f'(x) = e^x \frac{d}{dx}\cos(x) + \cos(x)\frac{d}{dx}e^x = -e^x \operatorname{sen}(x) + e^x\cos(x) = e^x(-\operatorname{sen}(x) + \cos(x))$$

$$f'(x) = e^x(\cos(x) - \operatorname{sen}(x)).$$

$$f''(x) = e^x \frac{d}{dx}(\cos(x) - \operatorname{sen}(x)) + (\cos(x) - \operatorname{sen}(x))\frac{d}{dx}e^x$$

$$= e^x\left[-\operatorname{sen}(x) - \cos(x)\right] + (\cos(x) - \operatorname{sen}(x))e^x$$

$$= e^x\left[-\operatorname{sen}(x) - \cancel{\cos(x)} + \cancel{\cos(x)} - \operatorname{sen}(x)\right] = -2e^x\operatorname{sen}(x)$$

$$f'''(x) = -2e^x \frac{d}{dx}\operatorname{sen}(x) + \operatorname{sen}(x)\frac{d}{dx}(-2e^x) = -2e^x\cos(x) - 2e^x\operatorname{sen}(x)$$

$$f'''(x) = -2e^x(\cos(x) + \operatorname{sen}(x))$$

$$f^{IV}(x) = -2e^x\frac{d}{dx}(\cos(x) + \operatorname{sen}(x)) + (\cos(x) + \operatorname{sen}(x))\frac{d}{dx}(-2e^x)$$

$$= -2e^x\left[-\operatorname{sen}(x) + \cos(x)\right] - 2e^x\left[\cos(x) + \operatorname{sen}(x)\right]$$

$$\cancel{= -2e^x\left[-\operatorname{sen}(x) + \cos(x) + \cos(x) + \operatorname{sen}(x)\right]} = -2e^x\left[-2\operatorname{sen}(x)\right] = 4\operatorname{sen}(x)$$

$$= 4e^x\operatorname{sen}(x)$$

$$f^{IV}(x) = -2e^x\left[-\cancel{\operatorname{sen}(x)} + \cos(x) + \cos(x) + \cancel{\operatorname{sen}(x)}\right] = -4e^x\cos(x)$$

METODOS NUMERICOS
1er EXAMEN PARCIAL
Adolfo Hernandez Ramirez

$f(0) = e^{(0)} \cos(0) = 1$

$f'(0) = e^{(0)} (\cos(0) - \text{sen}(0)) = 1$

$f''(0) = -2e^{(0)} \text{sen}(0) = 0$

$f'''(0) = -2e^{(0)} (\cos(0) + \text{sen}(0)) = -2.$

$f(0.5) = 1 + 1(0.5) + \cancel{\frac{(0)(0.5)^2}{2!}}^{0} + \frac{(-2)(0.5)^3}{3!}$

$f(0.5) = 1 + 0.5 - 0.0416 = \underline{\underline{1.4584}}$

c) Error verdadero

$f(0.5) = e^{(0.5)} \cos(0.5) = 1.4468$

$E_v = |1.4468 - 1.4584| = |-0.0116| = \underline{\underline{0.0116}}$

d) Error truncamiento

$R = \frac{f^{iv}(\xi) h^4}{4!}$ donde $\xi = \frac{0.5 + 0}{2} = 0.25$

$f^{iv}(\xi) = -4e^{(0.25)} \cos(0.25) = -4.9764$

$R = \frac{(-4.9764)(0.5)^4}{4!} = \frac{-0.3110}{4!} = \underline{\underline{-0.0129}}$

Ejercicio 6

Los métodos numéricos son fundamentales en química y en otras ciencias por que nos permiten resolver problemas complejos que no tienen solución exacta o cuya solución analítica sea demasiada complicada.

En Ingeniería existen varios casos donde las funciones que describen un fenómeno físico y/o químico no tienen solución analítica o es difícil obtenerla tales como

Cinética de reacción compleja

$r = k \frac{C_A C_B}{1 + K C_A}$

Optimización de procesos para minimizar costos, consumo energético o maximizar ganancias

Balances de materia y energía en columnas y reactores

Ya que en ocasiones son sistemas lineales o no.