

Primer examen parcial

David Isaac Oliva Villar

Septiembre 2025

Corrección del primer examen parcial - Métodos Numéricos
Prof. Alma Xóchitl González Morales

1. 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.

- (a) El error de truncamiento se origina al aproximar una expresión matemática infinita mediante un número finito de términos, por ejemplo al cortar una serie de Taylor. El error de redondeo proviene de la representación limitada de los números en una computadora o instrumento, como almacenar 0.333 en vez de $1/3$. La diferencia es que el truncamiento depende del método empleado y el redondeo de las limitaciones numéricas del sistema de cómputo.
- (b) La exactitud indica qué tan cercano está un valor medido respecto al valor verdadero. La precisión refleja la consistencia al repetir la medición, independientemente de si se acerca al valor real.
- (c) El error de modelado surge cuando el modelo matemático no representa muy bien a la realidad, como usar la ecuación de Peng-Robinson para modelar sistemas con líquidos, o usar una ecuación de estado normal sin el ajuste necesario al modelar electrolitos. El error de medición aparece durante la toma de datos por limitaciones del instrumento, condiciones externas o errores humanos. La diferencia es que el primero depende de la idealización teórica y el segundo de la práctica experimental.

2. Considera la función $f(x) = x - e^{-x^2}$.

- (a) 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 explícitamente?

- (a) Usando la función de iteración $g_1(x) = \sqrt{-\ln(x)}$ con $x_0 = 0.5$, se obtienen las siguientes iteraciones:

$$x_1 = g_1(0.5) = \sqrt{-\ln(0.5)} = 0.8326,$$

$$x_2 = g_1(x_1) = \sqrt{-\ln(0.8326)} = 0.4281,$$

$$x_3 = g_1(x_2) = \sqrt{-\ln(0.4281)} = 0.9211.$$

La secuencia oscila sin acercarse a la raíz real ($x \approx 0.6529$). Además,

$$g'_1(x) = -\frac{1}{2x\sqrt{-\ln(x)}}, \quad |g'_1(x)| \approx 1.173 > 1,$$

lo cual confirma que el método diverge.

- (b) Definiendo ahora la función de iteración $g_2(x) = e^{-x^2}$ con el mismo valor inicial $x_0 = 0.5$, se obtiene:

$$x_1 = g_2(0.5) = e^{-0.25} = 0.7788,$$

$$x_2 = g_2(x_1) = e^{-(0.7788)^2} = 0.5452,$$

$$x_3 = g_2(x_2) = e^{-(0.5452)^2} = 0.7428.$$

En este caso, los valores se aproximan de manera oscilante hacia la raíz $x \approx 0.6529$, por lo que el método sí converge. Asimismo:

$$g'_2(x) = -2xe^{-x^2}, \quad |g'_2(x)| \approx 0.853 < 1,$$

lo que garantiza convergencia sin necesidad de realizar las iteraciones explícitamente.

3. 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 que consiste el método.
- (b) Realiza dos iteraciones. Reporta el error relativo
- (c) Compara la aproximación después de dos iteraciones con la raíz verdadera, (≈ 0.7931). Reporta el error absoluto

(a) **Explicación.** El método de Newton-Raphson busca una raíz aproximando la función con su recta tangente en un punto x_n . Luego toma la intersección de esa tangente con el eje x como el siguiente valor x_{n+1} . Al repetir el proceso, se suele acercar rápidamente a la raíz siempre que el valor inicial esté lo bastante cerca y la función que se analice lo permita, ya que no con todas las funciones puede converger rápido.

(b)

$$x_1 = x_0 - \frac{\cos(0.5) - 0.5}{-\sin(0.5) - 1} = 0.7552224171,$$

$$x_2 = x_1 - \frac{\cos(0.7552224171) - 0.7552224171}{-\sin(0.7552224171) - 1} = 0.7391416661.$$

$$\text{Error relativo aproximado (por iteración)} \varepsilon_a = \left| \frac{x_{n+1} - x_n}{x_{n+1}} \right|:$$

$$\varepsilon_a^{(1)} = 33.79\%, \quad \varepsilon_a^{(2)} = 2.18\%.$$

(c) **Comparación con la raíz verdadera.** La raíz correcta de $\cos(x) - x = 0$ es

$$x \approx 0.7390851332$$

El error absoluto tras dos iteraciones es:

$$|x_2 - x| = |0.7391416661 - 0.7390851332| = 5.65 \times 10^{-5}.$$

Este error es bastante pequeño, lo que nos indica que el método converge demasiado rápido y con buena cercanía al valor real.

4. Para el ejercicio anterior realiza dos iteraciones para el método de bisección y dos para el método de falsa posición. ¿Cuál de los dos métodos converge más rápido?.

(a) **Bisección**

$$\text{Iter. 1: } c_1 = \frac{0+1}{2} = 0.5, \quad f(c_1) = \cos(0.5) - 0.5 \approx 0.3776 > 0$$

$$\Rightarrow [x_l, x_u] = [0.5, 1]$$

$$\text{Iter. 2: } c_2 = \frac{0.5+1}{2} = 0.75, \quad f(c_2) = \cos(0.75) - 0.75 \approx -0.01831 < 0$$

$$\Rightarrow [x_l, x_u] = [0.5, 0.75], \quad x_{\text{bis}}^{(2)} = 0.75.$$

(b) **Falsa posición**

$$\text{Iter. 1: } x_1 = b - \frac{f(b)(b-a)}{f(b)-f(a)} = 1 - \frac{(-0.4597)(1-0)}{-0.4597-1} \approx 0.685073,$$

$$f(x_1) \approx 0.08930 > 0 \Rightarrow [a, b] = [0.685073, 1]$$

$$\text{Iter. 2: } x_2 = b - \frac{f(b)(b-a)}{f(b)-f(a)} \approx 1 - \frac{(-0.4597)(1-0.685073)}{-0.4597-0.08930} \approx 0.736299,$$

$$f(x_2) \approx 0.004660 > 0 \Rightarrow [a, b] = [0.736299, 1], \quad x_{\text{fp}}^{(2)} = 0.736299.$$

(c) La raíz verdadera es $x \approx 0.7390851332$.

$$\text{Bisección: } |x_{\text{bis}}^{(2)} - x| = |0.75 - 0.7390851332| \approx 1.0915 \times 10^{-2},$$

$$\text{Falsa posición: } |x_{\text{fp}}^{(2)} - x| = |0.736299 - 0.7390851332| \approx 2.7861 \times 10^{-3}.$$

Tras dos iteraciones, el método de *falsa posición* se acerca más a la raíz (obtuvo un menor error absoluto), por lo que *converge más rápido* que el método de bisección en este caso con el intervalo utilizado.

5. 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 de la serie de Taylor.

Usaremos el polinomio de Taylor de orden 3 alrededor de $x = 0$ (Maclaurin), y $R_3(x)$ para el residuo (forma de Lagrange):

$$f(x) = \underbrace{T^{(3)}(x)}_{\sum_{k=0}^3 \frac{f^{(k)}(0)}{k!} x^k} + \underbrace{R_3(x)}_{\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} x^4}, \quad \xi \in (0, x).$$

Usamos la regla del producto $(uv)' = u'v + uv'$
 $\frac{d}{dx}(e^x) = e^x$, $\frac{d}{dx}(\cos x) = -\sin x$, $\frac{d}{dx}(\sin x) = \cos x$.

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

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

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

$$f^{(3)}(x) = \frac{d}{dx}(e^x(-2 \sin x)) = e^x(-2 \sin x) + e^x(-2 \cos x) = -2e^x(\sin x + \cos x),$$

$$f^{(4)}(x) = \frac{d}{dx}(-2e^x(\sin x + \cos x)) = -2[e^x(\sin x + \cos x) + e^x(\cos x - \sin x)] = -4e^x \cos x.$$

Evaluando en $x = 0$ (con $e^0 = 1$, $\cos 0 = 1$, $\sin 0 = 0$):

$$f(0) = 1, \quad f'(0) = 1, \quad f''(0) = 0, \quad f^{(3)}(0) = -2, \quad f^{(4)}(0) = -4.$$

a) **Polinomio de Taylor (orden 3) en $x = 0$:**

$$T^{(3)}(x) = \frac{f(0)}{0!}x^0 + \frac{f'(0)}{1!}x^1 + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \frac{f^{(3)}(0)}{3!}x^3 = 1 + x + 0 \cdot \frac{x^2}{2} - 2 \cdot \frac{x^3}{6} = \boxed{1 + x - \frac{x^3}{3}}.$$

b) **Aproximación de $f(0.5)$ con $T^{(3)}$:**

$$T^{(3)}(0.5) = 1 + 0.5 - \frac{(0.5)^3}{3} = 1.5 - \frac{0.125}{3} = 1.5 - 0.0416666667 = \boxed{1.4583333333}.$$

c) **Error verdadero.**

$$f(0.5) = e^{0.5} \cos(0.5) \approx 1.6487212707 \times 0.8775825620 = \boxed{1.4468890366}.$$

$$E_{\text{verd}} = |f(0.5) - T^{(3)}(0.5)| = |1.4468890366 - 1.4583333333| = 1.1444296749 \times 10^{-2}.$$

Si no se usara el valor absoluto, el error tendría signo negativo porque la serie de Taylor hasta esta evaluación sin tomar en cuenta el residuo, da un valor más alto que el real.

d) **Error aproximado de truncamiento:**

$$R_3(0.5) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(0.5)^4 = \frac{-4e^\xi \cos \xi}{24} \cdot 0.0625 = -\frac{e^\xi \cos \xi}{96}, \quad \xi \in (0, 0.5).$$

Estimación local (primer término omitido en 0):

$$\tilde{R}_3(0.5) \approx \frac{f^{(4)}(0)}{4!}(0.5)^4 = \frac{-4}{24} \cdot 0.0625 = -\frac{1}{96} \approx -1.0417 \times 10^{-2},$$

coherente en orden de magnitud y signo con el error verdadero.

6. 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

Los métodos numéricos son esenciales en prácticamente toda área científica porque la realidad no se modela tan cercana con una ecuación y ya, enfocándonos en el casos industriales y bastante claros de aplicaciones, está la simulación de procesos y termodinámica química porque la mayoría de los problemas relevantes (equilibrios de fase, propiedades a temperatura–presión–composición especificadas y balances acoplados) son no lineales y no admiten solución analítica útil. Un caso típico es el cálculo de *puntos de burbuja* y *puntos de rocío* para asegurar que un reactor opere en una sola fase. Estos cálculos requieren evaluar coeficientes de fugacidad y seleccionar la raíz física de una ecuación de estado, siendo necesario para ambos el uso de los métodos numéricos para su resolución.

Para este fin se usa ampliamente la ecuación de estado de **Peng–Robinson** (PR), una ecuación de estado polinomial mucho más compleja que la ecuación del gas ideal o incluso la de Van der Waals, puesto que permite obtener el factor de compresibilidad, las fugacidades y, a partir de ellas, las composiciones de equilibrio:

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a \alpha(T, \omega)}{V_m (V_m + b) + b (V_m - b)}, \quad a = \frac{0.45724 R^2 T_c^2}{P_c}, \quad b = \frac{0.07780 RT_c}{P_c},$$

$$\alpha(T, \omega) = [1 + \kappa (1 - \sqrt{T/T_c})]^2, \quad \kappa = 0.37464 + 1.54226 \omega - 0.26992 \omega^2.$$

En la práctica, para un punto de burbuja o de rocío a temperatura fija se busca por iteración la presión que satisface el equilibrio. Cada evaluación requiere resolver la ecuación cúbica de PR para cada fase y elegir la raíz coherente (líquido: Z menor; vapor: Z mayor), después calcular coeficientes de fugacidad con las reglas de mezcla, luego actualizar las relaciones de equilibrio y composiciones, y finalmente, ajustar la presión hasta que el residuo sea menor que una tolerancia.

Se emplea principalmente el método de Newton-Raphson para la búsqueda de las raíces (recordando lo visto en la clase de Termodinámica Química) para la evaluación de los puntos burbuja y de rocío, vitales en el diseño, ya que hay reactores que solo operan en una fase y de estar presente una que no se tolere se pueden generar accidentes enormes.