Martínez Tracto Laura Iveth

1.- Explica claramente los siguientes conceptos y la diferencia entre ellos

a) Error de truncamiento y error de redondeo

* El error de truncamiento es la diferencia entre el valor exacto de la función y su aproximación método numérico, resultando de usar una aproximación en lugar de un procedimiento matemático exacto
* Los errores de redondeo se originan debido a que la computadora puede guardar un número fijo de cifras significativos durante el calculo. Los números tales como π, e o $\sqrt{7}$ no pueden ser expresados por un número fijo de cifras significativas, por lo tanto, no pueden ser representados exactamente por la computadora. Esta discrepancia por la omisión de cifras significativos es llamada error de redondeo.

La diferencia entre ellos es que el truncamiento es una aproximación ya que se decide no usar el o calcular el valor exacto, mientras que el de redondeo, es que la computadora no puede guardar valores fijos de números con muchos decimales

b) Exactitud y precisión

* La exactitud se refiere a qué tan cercano está el valor calculado o medido con el valor verdadero
* La presición se refiere a qué tán cercano está un valor individual medido o calculado respecto a los otros

La diferencia es que la exactidud se basa en un valor verdadero, mientras que la precisión se basa en otros valores medidos

c) Error de modelado y error de medición

* Un error de modelado ocurre cuando un modelo, ya sea de datos, físico o de un proceso, no representa fielmente la realidad o falla debido a inconsistencias omisiones o interpretaciones incorrectas.
* Un error de medición es la diferencia entre el valor que se ha medido y el valor real o verdadero de la magnitud que se está midiendo.

La diferencia es que el error de modelado viene dado por el sistema que se trabaja, y el error de medición es por instrumentos mal elegidos para la medición

2.- Considera la Función $F(x) = x = x - e^{-x^2}$

a) Realiza tres iteraciones del método de punto fijo, usando $g(x) = \sqrt{-\ln(x)}$ con valor inicial $x_0 = 0.5$. Determina si la raíz está convergiendo o no

$x_{i+1} = g(x_0)$

$x_1 = \sqrt{-\ln(0.5)} = 0.8325 \qquad \varepsilon = \frac{0.8325 - 0.5}{0.8325} = 0.399$

$x_2 = \sqrt{-\ln(0.8325)} = 0.4281 \qquad \varepsilon = \frac{0.4281 - 0.8325}{0.4281} = -0.945$

$x_3 = \sqrt{-\ln(0.4281)} = 0.9211 \qquad \varepsilon = \frac{0.9211 - 0.4281}{0.9211} = 0.535$

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

Si converge, pero si x llega a ser 0 la derivada diverge a $-\infty$ o cuando $x \geq 1$ $-\ln(x)$ deja de ser positivo y la raíz deja de ser real

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?

$F(x) = x - e^{-x^2} \Rightarrow x - e^{-x^2} = 0 \Rightarrow x = e^{-x^2}$

$g(x) = e^{-x^2}$

$x_1 = e^{-0.5^2} = 0.778 \qquad \varepsilon = \frac{0.778 - 0.5}{0.778} = 0.357$

$x_2 = e^{-0.778^2} = 0.546 \qquad \varepsilon = \frac{0.546 - 0.778}{0.546} = -0.424$

$x_3 = e^{-0.546^2} = 0.742 \qquad \varepsilon = \frac{0.742 - 0.546}{0.742} = 0.264$

$g'(x) < 1$ converge

$g'(x) > 1$ diverge

Si converge

Se determina calculando la derivada de $g(x)$ y evaluando en $x = 0.5$, por lo que si converge

$g'(x_0) = -2e^{-x^2} = -1.55 < 1$

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 qué consiste el método

El método de Newton-Raphson es un procedimiento numérico iterativo para encontrar raíces de una función $F(x) = 0$, que utiliza la aproximación de la recta tangente en un punto inicial x_0 para obtener mejores estimaciones sucesivas de la solución.

b) Realiza dos iteraciones. Reporta el error relativo

$F(x_0) = \cos(0.5) - (0.5) = 0.377$

$F'(x_0) = -\operatorname{sen}(x) - 1 \Rightarrow -\operatorname{sen}(0.5) - 1 = -1.479$

$x_1 = 0.5 - \dfrac{0.377}{-1.479} = 0.755$ $\qquad \varepsilon = \dfrac{0.755 - 0.5}{0.755} = 0.337$

$F(x_1) = \cos(0.755) - (0.755) = -0.0267$

$F'(x_1) = -\operatorname{sen}(0.755) - 1 = -1.685$

$x_1 = 0.755 - \dfrac{(-0.0267)}{-1.685} = 0.739$ $\qquad \varepsilon = \dfrac{0.739 - 0.755}{0.739} = 0.021$

c) Compara la aproximación después de dos iteraciones con la raíz verdadera (≈ 0.7391). Reporta el error absoluto

$0.7391 - 0.739 = 1 \times 10^{-4}$

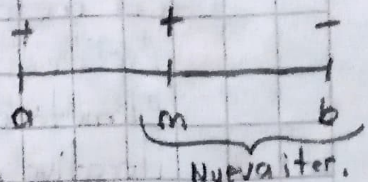
Resuelto en radianes

Resuelto en Radianes

4.- Para el ejercicio anterior realiza 2 iteraciones para el método de bisección y 2 para el método de Falsa posición ¿Cuál converge más rápido?

Método de bisección

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



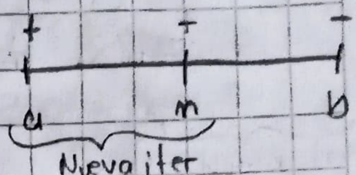
$a = 0$ $\qquad m = \dfrac{0+1}{2} = 0.5$

$b = 1$

$F(a) = \cos(0) - 0 = 1$

$F(b) = \cos(1) - 1 = -0.459$

$F(m) = \cos(0.5) - 0.5 = 0.377$



$a = 0.5$ $\qquad m = \dfrac{0.5+1}{2} = 0.75$

$b = 1$

$F(a) = \cos(0.5) - 0.5 = 0.377$

$F(b) = \cos(1) - 1 = -0.459$

$F(m) = \cos(0.75) - 0.75 = -0.018$

La raíz aproximada es: 0.75

Comparando ambos métodos, converge más rápido el de Falsa posición ya que se acerca más rápido a la raíz verdadera

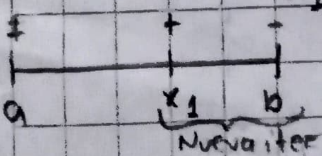
Método de Falsa posición

$$F(x) = \cos(x) - x = 1$$

$a = 0$ $\qquad F(a) = \cos(0) - 0 = 1$

$b = 1$ $\qquad F(b) = \cos(1) - 1 = -0.459$

$$x_1 = \frac{-F(a)\cdot b + F(b)\cdot a}{F(b) - F(a)} = \frac{(-1)(1) + (-0.459)(0)}{-0.459 - 1} = 0.685$$



$F(x_1) = \cos(0.685) - 0.685 = 0.089$

$a = 0.685$ $\qquad F(a) = \cos(0.685) - 0.685 = 0.089$

$b = 1$ $\qquad F(b) = \cos(1) - 1 = -0.459$

$$x_2 = \frac{(-0.089)(1) + (-0.459)(0.685)}{-0.459 - 0.089} = 0.736$$

$\varepsilon = 0.736 - 0.685 = 0.051$

La raíz aproximada es: 0.736

5.- Considera la Función

$$F(x) = e^{x}\cos(x)$$

a) Encuentra el polinomio de Taylor de orden 3 de $F(x)$ alrededor de $x=0$

$F(x) = e^{x}\cos(x)$

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

$F''(x) = -2e^{x}\operatorname{sen}(x)$

$F^{(3)}(x) = -2e^{x}(\operatorname{sen} x + \cos x)$

$F^{(4)}(x) = -4e^{x}\cos(x)$

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

$F'(x) = F'(0) = e^{0}(\cos(0) - \operatorname{sen}(0)) = 1$

$F''(x) = F''(0) = -2e^{0}\operatorname{sen}(0) = 0$

$F^{(3)}(x) = F^{(3)}(0) = -2e^{0}(\operatorname{sen}(0) + \cos(0)) = -2$

$$F(x_{i+1}) = F(x_i) + F'(x_i)\overbrace{(x_{i+1} - x_i)}^{h} + F''(x_i)\frac{\overbrace{(x_{i+1} - x_i)}^{h}{}^2}{2!} + F^{(3)}(x_i)\frac{\overbrace{(x_{i+1} - x_i)}^{h}{}^3}{3!}$$

$$F(x_{i+1}) = 1 + h + \cancel{0 \cdot h^2}^{\,0} + \frac{-2}{3!}h^3$$

$$F(x_{i+1}) = 1 + h - \frac{1}{3}h^3$$

b) Usa este polinomio para aproximar $F(0.5)$

$$F(0.5) = 1 + 0.5 - \frac{1}{3}(0.5)^3 = 1.4583$$

c) Calcula el error verdadero comparando con el valor exacto $F(0.5)$

Valor real

$$F(0.5) = e^{0.5}\cos(0.5) = 1.4469$$

Error verdadero

$$E = 1.4469 - 1.4583 = -0.0114 \Rightarrow \text{abs} = 0.0114$$

d) ¿Cuál es el error aproximado de truncamiento? Tip: Usa el R_n

$$R_n = \frac{F^{(n+1)}(x_i)\, h^{(n+1)}}{n+1!} \Rightarrow R_n = \frac{F^{(4)}(x_i)\, h^{(4)}}{4!}$$

$$R_n = \frac{-4e^{0}\cos(0)\,(0.5)^4}{4!} = -0.0104$$

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 química porque la mayoría de los problemas reales, no tienen un valor exacto al hacerlo en papel, así los problemas "imposibles" de resolver analíticamente se convierten en soluciones aproximadas pero útiles.

Un ejemplo es en termodinámica química que se buscan raíces en las ecuaciones de estado para encontrar el volumen molar del sistema en condiciones dadas. Esto permite identificar fases, predecir coexistencia de líquido-vapor y calcular las propiedades termodinámicas reales.