Durán Holz. Luis

Primer examen parcial: métodos numéricos

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

a) Error de truncamiento y error de redondeo

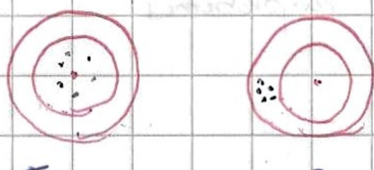
Error de truncamiento: error asociado al reemplazar un método infinito por una aproximación finita. (Por ejemplo: la serie de Taylor)

Error de redondeo: Error asociado a limitar los dígitos de un número decimal. (Por ejemplo: π)

b) Exactitud y precisión

Exactitud: concordancia entre un valor aproximado y el valor real.

Precisión: cercanía entre un conjunto de datos o mediciones, sin importar el valor verdadero.



Exactitud Precisión

c) Error de modelado y error de medición

Error de modelado: Error asociado al modelo usado, pues un modelo puede ser útil para algunas cosas, más no para otras.

Error de medición: Error asociado a; por ejemplo: el instrumento, el método usado para medir o incluso a errores humanos.

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

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 converge o no.

$g_1(x_0) = x_1$

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

No parece converger, pero, comprobemos

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

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

$$g'_1(x) = \frac{1}{2}\left(-\ln(x)\right)^{-1/2}\left(\frac{1}{x}\right) = -\frac{1}{2x\sqrt{-\ln(x)}}$$

$$\left|g'_1(x)\right| = \left|-\frac{1}{2(0.5)\sqrt{-\ln(0.5)}}\right| = 1.20 > 1 \Rightarrow \text{diverge}$$

b) Define otra función $g(x)$ y realiza de nuevo 3 iteraciones. En este caso, ¿converge o no? ¿Cómo se determina si el método converge o no, sin necesidad de realizar las iteraciones explícitamente?

$$g_2(x) \Rightarrow x = e^{-x^2}$$

$$x_1 = e^{-0.5^2} = 0.7788$$

$$x_2 = e^{-0.7788^2} = 0.5452$$

$$x_3 = e^{-0.5452^2} = 0.7428$$

Parece que converge algo lento, pero comprobemos

$$g'_2(x) = -e^{-x^2}(2x) = -2x e^{-x^2}$$

$$\left|g'_2(x)\right| = \left|-0.5(2)e^{-0.5^2}\right| = 0.7788 < 1 \Rightarrow \text{converge}$$

El criterio es que si $|g'_n(x)| < 1$, entonces esta función va a converger, si no, esta diverge

3 - La ecuación para la constante de equilibrio de una rxn química se puede resolver:

Usa N-R con $x_0 = 0.5$:

a) Explica en qué consiste el método

Consiste en aproximar la función mediante su recta tangente en un punto cercano a la raíz y luego usar ese nuevo punto dado por la tangente para

Duran Melo Luis

tener una mejor aproximación nueva.

b) Realiza dos iteraciones y reporta el error relativo.

$f'(x) = -\sin(x) - 1$

$\therefore g(x_0) = x_1 = x_0 - \dfrac{f(x_0)}{f'(x_0)}$

$g(x_0) = x_1 = 0.5 - \dfrac{[\cos(0.5) - 0.5]}{[-\sin(0.5) - 1]} = 0.7552$

$g(x_1) = x_2 = 0.7552 - \dfrac{[\cos(0.7552) - 0.7552]}{[-\sin(0.7552) - 1]} = 0.7391$

$\varepsilon_{a_1} = \left| \dfrac{0.7552 - 0.5}{0.7552} \right| = 0.3379$

$\varepsilon_{a_2} = \left| \dfrac{0.7391 - 0.7552}{0.7391} \right| = 0.0218$

c) Compara la aproximación después de dos iteraciones con la raíz

$E_a = |0.7391 - 0.7391| = 0.0000$

4- 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?

Bisección

Tomando $[0.65, 0.85]$

1- $K = \dfrac{0.65 + 0.85}{2} = 0.75$

$f(a) \cdot f(b) < 0$

$f(a) \cdot f(K) < 0 \therefore b = K$

2- $[0.65, 0.75]$

$$K = \frac{0.65 + 0.75}{2} = 0.70$$

$$Ea = |0.70 - 0.7391| = 0.0391$$

Falsa posición

1- $$K = \frac{0.65(-0.1900) - (0.85)(0.1461)}{-0.1900 - 0.1461} = 0.7369$$

$f(a) \cdot f(K) > 0 \therefore a = K$

2- $$K = \frac{0.7369(-0.1900) - (0.85)(0.0036)}{-0.1900 - 0.0036} = 0.7390$$

$$Ea = |0.7390 - 0.7391| = 0.0001$$

Falsa posición converge más rápido.

5- Considere la función

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

a) Encuentre el polinomio de Taylor grado 3 de $f(x)$ alrededor a $x = 0$

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

$$+ \frac{f^{(3)}(x_i)(x_{i+1} - x_i)^3}{3!}$$

$f'(x_i) = e^x(-\sin(x)) + e^x \cos x$

$f''(x_i) = e^x(\cos(x)) + e^x(-\sin(x)) + e^x(-\sin(x)) + e^x \cos(x)$

$f''(x_i) = -2e^x \sin(x)$

$f^{(3)}(x_i) = -2e^x(\cos(x)) - 2e^x \sin(x)$

$$f(x_{i+1}) = 1 + 1(x_{i+1}) + \frac{0}{2}(x_{i+1})^2 + \frac{-2}{6}(x_{i+1})^3$$

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

Durán Hdz. Luis

D | M | A

b) Use el polinomio para aproximar $f(0.5)$

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

$$f(0.5) = 1.4583$$

c) Calcule el error verdadero

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

$$E_v = \left| 1.4469 - 1.4583 \right| = 0.0114$$

d) ¿Cuál es el error de truncamiento?

$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)(x_{i+1})^{n+1}}{(n+1)!}$$

$$R_3 = \frac{f^{(4)}(\xi)(0.5)^4}{4!}$$

$$f^{(4)} = \cancel{-2e^x(-\sin(x))} - 2e^x(\cos(x)) - 2e^x\cos(x) \cancel{- 2e^x\sin(x)}$$

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

$\xi = 0.25 \rightarrow$ valor intermedio

$$R_3 = \frac{\left(-4e^{0.25}\cos(0.25)\right)(0.5)^4}{4!} = -0.01296$$

6- Explique por qué son importantes los métodos numéricos en química y otras ciencias?

Son importantes ya que nos ayudan a resolver ecuaciones o modelos que usualmente no tienen una solución analítica, por ejemplo: para el diseño de equipos de ingeniería, a veces se usan modelos de optimización para encontrar los parámetros adecuados por medio de ecuaciones no lineales.